

ÉCOLE DE TECHNOLOGIE SUPÉRIEURE
UNIVERSITÉ DU QUÉBEC

MÉMOIRE PRÉSENTÉ À
L'ÉCOLE DE TECHNOLOGIE SUPÉRIEURE

COMME EXIGENCE PARTIELLE
À L'OBTENTION DE LA
MAÎTRISE AVEC MÉMOIRE EN GÉNIE MÉCANIQUE
M. Sc. A.

PAR
Rémy BRETIN

DÉVELOPPEMENT D'UN MODÈLE ANALYTIQUE POUR L'ANALYSE EN
ÉLASTICITÉ LINÉAIRE DE CHAMPS DE DÉFORMATION ET CONTRAINTE AU SEIN
D'UN POLYCRISTAL. COMPARAISON AVEC LA MÉTHODE DES ÉLÉMENTS FINIS

MONTREAL, LE 14 MARS 2016



Rémy Bretin, 2016



Cette licence Creative Commons signifie qu'il est permis de diffuser, d'imprimer ou de sauvegarder sur un autre support une partie ou la totalité de cette oeuvre à condition de mentionner l'auteur, que ces utilisations soient faites à des fins non commerciales et que le contenu de l'oeuvre n'ait pas été modifié.

PRÉSENTATION DU JURY

CE MÉMOIRE A ÉTÉ ÉVALUÉ

PAR UN JURY COMPOSÉ DE:

M. Philippe Bocher, directeur de mémoire
Professeur au département de Génie mécanique à l'École de technologie supérieure

M. Henri Champlaud, président du jury
Directeur et professeur du département de Génie mécanique à l'École de technologie supérieure

M. Mohammad Jahazi, examinateur externe
Professeur au département de Génie mécanique à l'École de Technologie Supérieure

IL A FAIT L'OBJET D'UNE SOUTENANCE DEVANT JURY ET PUBLIC

LE 22 FÉVRIER 2016

À L'ÉCOLE DE TECHNOLOGIE SUPÉRIEURE

REMERCIEMENTS

Je tiens pour commencer à remercier mon directeur Philippe Bocher, et aussi Martin Lévesque. Ils m'ont tous les deux guidé et conseillé tout au long de ce projet. Merci à eux pour m'avoir partagé leur savoir, mais aussi pour m'avoir donné la chance de vivre cette expérience inoubliable à Montréal.

J'adresse un remerciement aux membres du jury pour avoir accepté d'évaluer ce mémoire.

Je tiens à souligner la participation des partenaires industriels (Bell Helicopter, Pratt and Whitney Canada, L3-Communication MAS, Héroux Devtek) qui a permis à ce projet de se réaliser.

Merci aux collègues du projet MANU508, et aussi ceux du LOPFA : j'ai eu beaucoup de plaisir à travailler avec eux et à discuter avec eux que ce soit au travail ou durant les potlucks.

Un grand merci à tous mes amis qui m'ont permis de me changer les idées et de profiter des nombreux loisirs et activités de Montréal. Je tiens à donner une mention spéciale pour mes amis F. Muller, M. Degeiter, G. Jégou et V. Poreau, pour leur soutien moral régulier, mais aussi à ma compagne I. Tahirgil qui m'a remonté le moral au moment où il était au plus bas.

Et pour finir, un grand merci à mes parents pour leur soutien constant et pour m'avoir transmis leurs valeurs. Ils m'ont toujours poussé à aller plus loin, et c'est ce qui m'a permis de me retrouver aujourd'hui ici.

DÉVELOPPEMENT D'UN MODÈLE ANALYTIQUE POUR L'ANALYSE EN ÉLASTICITÉ LINÉAIRE DE CHAMPS DE DÉFORMATION ET CONTRAINTE AU SEIN D'UN POLYCRISTAL. COMPARAISON AVEC LA MÉTHODE DES ÉLÉMENTS FINIS

Rémy BRETIN

RÉSUMÉ

L'endommagement par fatigue des matériaux est un problème courant dans de nombreux domaines, dont celui de l'aéronautique. Afin de prévenir la rupture par fatigue des matériaux il est nécessaire de déterminer leur durée de vie en fatigue. Malheureusement, dues aux nombreuses hétérogénéités présentes, la durée de vie en fatigue peut fortement varier entre deux pièces identiques faites dans le même matériau ayant subi les mêmes traitements. Il est donc nécessaire de considérer ces hétérogénéités dans nos modèles afin d'avoir une meilleure estimation de la durée de vie des matériaux.

Comme première étape vers une meilleure considération des hétérogénéités dans nos modèles, une étude en élasticité linéaire de l'influence des orientations cristallographiques sur les champs de déformations et de contraintes dans un polycristal a été réalisée à l'aide de la méthode des éléments finis. Des corrélations ont pu être établies à partir des résultats obtenus, et un modèle analytique en élasticité linéaire prenant en compte les distributions d'orientations cristallographiques et les effets de voisinage a pu être développé. Ce modèle repose sur les bases des modèles d'homogénéisation classique, comme le schéma auto-cohérent, et reprend aussi les principes de voisinage des automates cellulaires. En prenant pour référence les résultats des analyses éléments finis, le modèle analytique ici développé a montré avoir une précision deux fois plus grande que le modèle auto-cohérent, quel que soit le matériau étudié.

Mots clés: Automate Cellulaire, Modèle d'homogénéisation, Méthode des éléments finis, Polycristaux, Calculs d'agrégats, Inclusion d'Eshelby

DEVELOPMENT OF AN ANALYTICAL MODEL FOR THE ANALYSIS IN LINEAR ELASTICITY OF STRESS AND STRAIN FIELDS IN A POLYCRYSTAL. COMPARED WITH THE FINITE ELEMENT METHOD

Rémy BRETIN

ABSTRACT

Fatigue damage of materials is a common problem in many areas, including aeronautics. To prevent fatigue failure of materials it is necessary to determine the fatigue lives. Unfortunately, due to the presence of heterogeneities, two identical parts made of the same materials having undergone the same processing can have different fatigue lives. Therefore these heterogeneities should be considered in our models in order to have a better estimate of the fatigue life of materials.

As a first step towards a better consideration of heterogeneities in our models, a study in linear elasticity of the influence of crystallographic orientations on the strain and stress fields in a polycrystal was performed using the finite element method. Correlations have been established from the results, and an analytical model in linear elasticity taking into account the distributions of crystallographic orientations and neighborhood effects was developed. This model is based on conventional homogenization models, such as self-consistent model, and also incorporates the neighborhood principles of cellular automata. Taking as reference the results of finite element analysis, the analytical model here developed has shown to have an accuracy twice bigger than the self-consistent model, regardless of the material studied.

Keywords: Cellular Automaton, Homogeneization Model, Finite Elements Method, Polycrystals, Aggregate computation, Eshelby's inclusion

TABLE DES MATIÈRES

	Page
INTRODUCTION	1
CHAPITRE 1 REVUE DE LITTÉRATURE	5
1.1 Élasticité linéaire	5
1.1.1 Tenseur de rigidité et de souplesse	5
1.1.2 Élasticité cristalline	6
1.1.3 Angles d'Euler	7
1.2 Calculs d'agrégats polycristallins	10
1.2.1 Génération du polycristal	10
1.2.1.1 Génération des grains	11
1.2.1.2 Méthodes de génération aléatoire des orientations cristallographiques	11
1.2.1.3 Notion de VER	12
1.2.1.4 Conditions aux limites	13
1.2.2 Modèles Numériques : la méthode des Éléments Finis	14
1.2.3 Modèles Analytiques : les modèles d'homogénéisation	15
1.2.3.1 Principes de base sur les modèles d'homogénéisation	15
1.2.3.2 L'inclusion d'Eshelby	18
1.2.3.3 Modèles d'homogénéisation usuels	21
1.2.4 Modèles divers	23
1.2.5 Automates cellulaires	24
1.2.5.1 Principes des AC	25
1.2.5.2 Définition du réseau	26
1.2.5.3 Résumé du travail de M. Hamid Pourian	27
1.3 Plasticité cristalline	30
1.4 Résumé	30
CHAPITRE 2 ÉTUDE ÉLÉMENTS FINIS	33
2.1 Calcul d'agrégat cristallin par la méthode des ÉF	33
2.1.1 Définition et méthode de maillage de la structure de Kelvin	33
2.1.2 VER	36
2.1.3 Conditions aux limites	36
2.1.4 Traitement des résultats	38
2.1.5 Étude de convergence du maillage	38
2.1.6 Influence des conditions aux limites	40
2.1.7 Réalisation et analyse des calculs d'agrégats	41
2.2 Étude de l'influence du voisinage	44
2.2.1 Influence de la distance des grains voisins par rapport au grain central	45

2.2.2	Influence de la position des grains voisins par rapport au grain central	47
2.2.3	Influence de la position des grains voisins par rapport au grain central en fonction de l'orientation du grain central	52
2.2.4	Influence cumulée de grains voisins	54
2.2.5	Modélisation des facteurs α	61
2.3	Résumé	66
CHAPITRE 3 ÉLABORATION D'UN NOUVEAU MODÈLE ANALYTIQUE		69
3.1	Modifications apportées au modèle des automates-cellulaires	69
3.1.1	Choix du tenseur effectif	69
3.1.2	Redéfinition des tenseurs de localisations	70
3.1.3	Nouvelle méthode de considération du voisinage	71
3.1.4	Bilan sur le nouvel automate cellulaire	73
3.2	Comparaison du nouvel AC avec les simulations ÉF	75
3.2.1	Cas du cristal de Fer	75
3.2.2	Application du modèle aux cristaux d'aluminium et de nickel	76
CONCLUSION		81
RECOMMANDATIONS		83
ANNEXE I	NOTIONS ET CALCULS TENSORIELS	85
ANNEXE II	MÉTHODE DE CALCUL DU TENSEUR D'ESHELBY	91
ANNEXE III	BOITE À MOUSTACHES (BOX PLOT)	93
ANNEXE IV	GÉNÉRATION ALÉATOIRE DES ORIENTATIONS	95
ANNEXE V	MODÈLES D'HOMOGÉNÉISATION ÉLASTOPLASTIQUES	99
ANNEXE VI	LA PLASTICITÉ CRISTALLINE	103
ANNEXE VII	INSERTION DANS UN LOGICIEL DE CALCUL NUMÉRIQUE DE LA LOI DE COMPORTEMENT DE MÉRIC-CAILLETAUD (Proix, 2014)	113
BIBLIOGRAPHIE		119

LISTE DES TABLEAUX

	Page
Tableau 1.1	Constantes des tenseurs d'élasticité cristalline (notation de Voigt)(Simmons et Wang, 1971)..... 7
Tableau 2.1	Liste des orientations sélectionnées pour l'étude de l'influence des grains voisins individuellement 48
Tableau 2.2	Liste des grains sélectionnés, de leur position et de leurs symétries pour l'étude de l'influence des grains voisins individuellement..... 48
Tableau 2.3	Synthèse des différents résultats obtenus lors de l'étude de l'influence des grains voisins 51
Tableau 2.4	Valeurs numériques de la figure 2.11 (les numéros de simulation correspondent aux numéros indiqués sur les figures 2.10) 58
Tableau 2.5	Coefficients a_i obtenus après optimisation sur les résultats de la figure 2.7 65
Tableau 2.6	Interval de l'écart entre les résultats de la figure 2.7 et la méthode "Alpha" (Équation 2.13) 65
Tableau 3.1	Coefficients a_i obtenus après optimisation 79
Tableau 3.2	Valeur moyenne et maximale des écarts absolus de chaque grain entre la méthode ÉF et le modèle analytique normalisés par l'amplitude de contrainte..... 79

LISTE DES FIGURES

	Page
Figure 1.1	Expression du tenseur d'élasticité cubique et son repère associé..... 6
Figure 1.2	Expression du tenseur d'élasticité hexagonal et son repère associé 7
Figure 1.3	Schéma représentatif des angles d'Euler (Tulloue, 2015)..... 8
Figure 1.4	Module de Young dans la direction Z en fonction des angles d'Euler Φ et φ_2 8
Figure 1.5	Schéma illustrant la structure de Kelvin 11
Figure 1.6	Schéma illustrant les différentes étapes des modèles d'homogénéisation pour un chargement en déformation (en bleu) ou un chargement en contrainte (en rouge) (Di Paola, 2010) 17
Figure 1.7	Illustration du problème d'Eshelby : partie 1 19
Figure 1.8	Illustration du problème d'Eshelby : partie 2 20
Figure 1.9	Différents types de pavage pour automate cellulaire 27
Figure 2.1	Schéma illustrant les étapes de la construction de la structure de Kelvin 34
Figure 2.2	Évolution du biais numérique de la contrainte principale pour chaque grain du polycristal en fonction du maillage choisi..... 39
Figure 2.3	Schémas explicatifs de la validation des conditions aux limites périodiques 41
Figure 2.4	Résultats des simulations ÉF des dix jeux d'orientation sur un polycristal de fer de 686 grains en structure de Kelvin (6860 grains différents) 42
Figure 2.5	Schémas illustrant le maillage de l'étude de l'influence du voisinage 45
Figure 2.6	Influence des grains voisins en fonction de leur distance par rapport au grain central 46
Figure 2.7	Influence des grains voisins en fonction de leur orientation cristallographique et de leur position par rapport au grain central 49

Figure 2.8	Schéma illustrant les coordonnées sphériques du repère formé par le grain central et le grain voisin	51
Figure 2.9	Comparaison de l'influence des grains voisins ((1 ; 1 ; 1), (2 ; 0 ; 0), (0 ; 0 ; 2)) pour les différentes orientations du grain central ($\Delta\sigma_{principale}$: différence entre la contrainte principale du grain central immergé dans la matrice et avec un grain voisin d'orientation cristallographique prédéfinie et la contrainte principale du grain central immergé seul dans la matrice sans grain voisin)	53
Figure 2.10	Illustration des différentes simulations effectuées. En vert est représenté le grain central, en rouge les grains voisins ayant l'orientation la plus contraignante pour le grain central et en bleu l'orientation la moins contraignante. La matrice et tous les autres grains ont pour propriétés élastiques les propriétés effectives du matériau calculées précédemment (Éq. 2.10).....	55
Figure 2.11	Comparaison de l'influence des grains voisins ((1 ; 1 ; 1), (2 ; 0 ; 0), (0 ; 0 ; 2)) pour les différentes orientations du grain central ($\Delta\sigma_{principale}$: différence entre la contrainte principale du grain central immergé dans la matrice et avec ses grains voisins d'orientation cristallographique prédéfinie et la contrainte principale du grain central immergé seul dans la matrice sans grain voisin)	57
Figure 2.12	Comparaison de la contrainte principale du grain central (axe des ordonnées de gauche) et des composantes C_{3333} , C_{1133} et $\sqrt{2}C_{3313}$ du tenseur de rigidité du grain voisin exprimé dans le repère ϑ associé (Fig. 2.8)(axe des ordonnées de droite) pour différentes positions du grain voisin ((1 ; 1 ; 1), (2 ; 0 ; 0), (0 ; 0 ; 2))	63
Figure 2.13	Comparaison des résultats de la partie 2.2.1 avec les résultats obtenus par la méthode "Alpha"	66
Figure 3.1	Comparaison des résultats par la méthode des ÉF sur un polycristal en structure de Kelvin avec des grains orientés aléatoirement (10 simulations de 686 grains) de la partie 2.1.7 avec les résultats obtenus par les différentes méthodes analytiques	77
Figure 3.2	Comparaison de l'écart relatif entre le modèle AC_{64} et la méthode ÉF en fonction de différents paramètres	78

LISTE DES ABRÉVIATIONS, SIGLES ET ACRONYMES

ETS	École de Technologie Supérieure
ÉF	Éléments Finis
SC	Auto-cohérent (Self-Consistent)
AC	Automate-cellulaire
VER	Volume Élémentaire Représentatif
FFT	Fast Fourier Transformation (Transformation de Fourier Rapide)
CFC	Cubique à Face Centrée

LISTE DES SYMBOLES ET UNITÉS DE MESURE

T	Tenseur d'ordre 0 (scalaire)
\underline{T}	Tenseur d'ordre 1 (vecteur)
$\underline{\underline{T}}$	Tenseur d'ordre 2
\mathbb{T}	Tenseur d'ordre 4
:	Produit tensoriel contracté deux fois
$\langle A \rangle_V$	Valeur moyenne de A dans le volume/ensemble V
$\langle A \rangle$	Valeur maximale entre A et 0
$\underline{\underline{\Sigma}}$	Tenseur de contrainte effectif
$\underline{\underline{\sigma}}^C$	Tenseur de contrainte local
$\underline{\underline{E}}$	Tenseur de déformation effectif
$\underline{\underline{\epsilon}}^C$	Tenseur de déformation local
\mathbb{C}^{eff}	Tenseur de rigidité effectif
\mathbb{C}^C	Tenseur de rigidité local
\mathbb{S}^{eff}	Tenseur de souplesse effectif
\mathbb{S}^C	Tenseur de souplesse local
$\underline{\underline{I}}, \mathbb{I}$	Tenseur d'identité d'ordre 2 et 4
\mathbb{S}_E	Tenseur d'Eshelby
\mathbb{A}_E	Tenseur de localisation
E_{Young}	Module de Young
ν	Coefficient de poisson
MPa	Mégapascal
GPa	Gigapascal

INTRODUCTION

La rupture par fatigue des métaux est une problématique d'actualité dans plusieurs domaines industriels d'application, dont celui de l'aéronautique, de l'automobile, de l'énergie et bien d'autres encore. Dans le but de réduire leurs dépenses, les industries sont toujours à la recherche de moyens pour améliorer la durée de vie en fatigue des matériaux. De nombreux paramètres peuvent influencer la durée de vie des matériaux et différents procédés ont pour but de l'augmenter. Lors de l'évaluation de leur durée de vie en fatigue, les ingénieurs mécaniques considèrent le matériau comme étant homogène. Or si l'on regarde à l'échelle microscopique, les matériaux sont remplis d'hétérogénéités. Dans le cas de polycristaux elles peuvent de différentes formes : tailles et formes des grains, proportions des différentes phases et précipités, écrouissage mécanique, texture cristalline, joints de grain, etc. De manière générale une hétérogénéité est une variation des propriétés mécaniques au sein du matériau, et ces variations peuvent avoir un impact sur la durée de vie en fatigue du matériau. Les hétérogénéités d'un matériau ne sont pas totalement contrôlées : même si deux pièces sont fabriquées de la même manière (de forme identique, faites dans le même matériau, ayant subi les mêmes traitements), elles peuvent tout de même présenter des répartitions d'hétérogénéités différentes. Ces différences peuvent avoir des conséquences sur leur durée de vie en fatigue, et par conséquent les deux pièces peuvent montrer des comportements différents en fatigue.

Les hétérogénéités n'étant pas parfaitement contrôlées, elles peuvent alors avoir une distribution aléatoire. Elles peuvent créer localement des environnements néfastes tels que des concentrations de contrainte peuvent être observées autour d'un grain et donc engendrer l'amorçage de fissure rapide. Afin de définir la probabilité de se retrouver dans l'un de ces cas critiques, il est alors nécessaire de générer des bases de données statiques à l'aide de modèles analytiques.

Les modèles numériques, dont la méthode des éléments finis, sont les modèles les plus répandus pour l'étude comportementale d'agrégats cristallins. Mais ces modèles sont très coûteux au niveau du temps de calcul et moyen informatique. Afin d'avoir des données statistiques, il est alors nécessaire d'utiliser des modèles analytiques, qui sont peut-être moins précis, mais plus rapides à exploiter. La majorité des modèles analytiques appliqués aux calculs d'agrégats

repose sur la théorie de l'inclusion d'Eshelby. Malheureusement, ces modèles sont principalement développés pour évaluer le comportement homogénéisé des matériaux sans vraiment porter d'importance aux champs de déformation locaux. De plus dans les modèles élastoplastiques, la déformation élastique est souvent considérée comme étant homogène et seules les distributions de déformation plastique sont évaluées. Or il est important de bien capturer les champs de déformation élastique. Dans certain cas de fatigue, le niveau de contrainte est aux alentours de la limite élastique du matériau, et dans ces conditions, seule une partie des grains plastifie alors que les autres sont toujours en comportement élastique. Il est alors important de bien déterminer les champs de déformations élastiques pour pouvoir correctement déterminer quels grains vont plastifier.

Cette étude présente la première étape dans le développement d'un modèle analytique ayant pour objectif de prendre en considération au plus possible les hétérogénéités au sein des matériaux afin de mieux évaluer leur comportement en fatigue. Ce modèle pourrait être alors appliqué pour différents procédés dont le procédé de grenaillage qui a pour particularité d'insérer des contraintes résiduels au sein du matériau. Dans cette première étape du développement du modèle, les bases des modèles d'homogénéisation et des automates cellulaires ont été reprises. Les champs de déformations élastiques dans un polycristal ont été étudiés à l'aide de la méthode des ÉF en s'intéressant principalement à l'influence des orientations cristallographiques des grains tout en annulant les effets de taille et de forme des cristaux. Pour cela, la structure de Kelvin a alors été utilisée.

Ce travail s'inscrit dans la continuité des travaux réalisés par Boutana (2009) et Hamid Pourian (2014) au sein du Laboratoire d'Optimisation des Procédés de Fabrication en Aérospatial (LOPFA) sur les automates cellulaires. Il a aussi été réalisé dans le cadre du projet MANU508 qui a pour but de mieux comprendre le procédé de grenaillage et son effet sur le comportement en fatigue des matériaux. Il est le premier projet sur ce sujet et sûrement pas le dernier. Ce projet a été monté avec la collaboration de nombreux partenaires industriels liés au domaine de l'aéronautique (Bell Helicopter, Pratt and Whitney Canada, L3-Communication MAS, Héroux Devtek), trois universités montréalaises y participent (École polytechnique de Montréal, École

de technologie supérieure, l'université McGill), du CTA, et du soutien financier du CRIAQ, du CRSNG et du Mitacs. Il regroupe un ensemble de 5 étudiants au doctorat, 3 postdocs, le tout sous la supervision de 4 professeurs répartis dans les différentes universités.

Le logiciel d'éléments finis ANSYS Mechanical APDL, et le logiciel de calcul MATLAB ont été utilisés tout au long de ce travail afin de générer les maillages d'agrégat cristallin, réaliser les simulations ÉF, et de développer le modèle analytique.

L'objectif de ce mémoire est de développer un modèle analytique en élasticité linéaire prenant en considération les effets de voisinage dans un polycristal dus aux orientations cristallographiques. Pour cela, ce rapport se divise en trois grands chapitres. Pour commencer, une revue de la littérature a été faite concernant l'élasticité cristalline, la définition d'un agrégat cristallin et leurs méthodes de calculs permettant l'étude comportementale des polycristaux sous chargement élastique (méthode des ÉF ou modèles d'homogénéisation). Dans le second chapitre est étudiée l'influence de l'orientation du voisinage d'un grain grâce à la méthode des ÉF par la méthodologie suivante : la structure de Kelvin est utilisée afin d'annuler les effets de taille et de forme et de s'intéresser uniquement aux effets des orientations cristallographiques, et à l'aide de cette structure, les influences d'un ou plusieurs grains sur un autre grain ont été étudiées en fonction de leurs orientations et de leur position relative. Dans le troisième et dernier chapitre est présenté le développement du modèle analytique s'appuyant sur les hypothèses formulées à partir des observations faites dans le second chapitre. Après avoir défini le modèle analytique, il sera alors confronté aux résultats obtenus par la méthode ÉF.

CHAPITRE 1

REVUE DE LITTÉRATURE

1.1 Élasticité linéaire

1.1.1 Tenseur de rigidité et de souplesse

Dans un matériau, la relation entre le tenseur de déformation et le tenseur de contrainte en élasticité linéaire se fait de la manière suivante :

$$\begin{aligned}\underline{\underline{\sigma}} &= \mathbb{C} : \underline{\underline{\varepsilon}} \\ \underline{\underline{\varepsilon}} &= \mathbb{S} : \underline{\underline{\sigma}}\end{aligned}\tag{1.1}$$

Ces relations sont appelées loi de Hooke où \mathbb{C} et \mathbb{S} sont respectivement le tenseur de rigidité et le tenseur de souplesse. Ce sont des tenseurs d'ordre 4 et sont donc constitués de 81 composantes. Mais ces tenseurs présentent des symétries qui réduisent le nombre de composantes indépendantes à 21. Il existe donc des notations qui permettent d'exprimer ces tenseurs de manière simplifiée sous forme de matrice. La notation de Pedersen (cf. annexe 1.2), aussi appelée notation de Voigt modifiée, sera utilisée tout au long de ce rapport. En mécanique des matériaux l'expression la plus générale des tenseurs de rigidité et de souplesse est la suivante :

$$\mathbb{S} = \begin{bmatrix} \frac{1}{E_1} & \frac{-\nu_{12}}{E_1} & \frac{-\nu_{13}}{E_1} & 0 & 0 & 0 \\ \frac{-\nu_{21}}{E_2} & \frac{1}{E_2} & \frac{-\nu_{23}}{E_2} & 0 & 0 & 0 \\ \frac{-\nu_{31}}{E_3} & \frac{-\nu_{32}}{E_3} & \frac{1}{E_3} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2G_{23}} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2G_{13}} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2G_{12}} \end{bmatrix} \quad \text{et} \quad \mathbb{C} = \mathbb{S}^{-1}\tag{1.2}$$

où E_i est le module de Young suivant la direction i , G_{ij} le module de cisaillement dans le plan (i,j) et ν_{ij} le coefficient de Poisson dans le plan (i,j).

En annexe I sont présentées toutes les notions nécessaires pour une bonne compréhension des notations et des calculs tensoriels.

1.1.2 Élasticité cristalline

L'élasticité cristalline est liée aux interactions atomiques. Par conséquent, les propriétés élastiques d'un cristal vont dépendre de son type de maille cristallographie.

Les mailles de type cubique (cubique centré (fer α) ou bien cubique à faces centrées (fer γ , nickel, aluminium)) ont un tenseur d'élasticité de type cubique qui s'exprime dans leur repère associé à partir de ces trois constantes : un module de Young E_{Young} , un coefficient de poisson ν et un module de cisaillement G (Figure 1.1).

$$\mathbb{S} = \begin{bmatrix} \frac{1}{E_Y} & -\frac{\nu}{E_Y} & -\frac{\nu}{E_Y} & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{\nu}{E_Y} & \frac{1}{E_Y} & -\frac{\nu}{E_Y} & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{\nu}{E_Y} & -\frac{\nu}{E_Y} & \frac{1}{E_Y} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2G} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2G} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2G} \end{bmatrix}$$

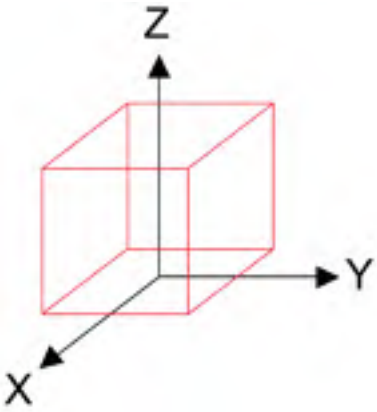


Figure 1.1 Expression du tenseur d'élasticité cubique et son repère associé

Les mailles de type hexagonal (hexagonal compact (magnésium, titane)) ont un tenseur d'élasticité de type isotrope transverse qui s'exprime dans leur repère associé à partir de ces cinq constantes : un module de Young E_l longitudinal, un module de Young E_t transverse, un coefficient de poisson ν_l longitudinal, un coefficient de poisson ν_t transversal et un module de cisaillement G (Figure 1.2).

$$S = \begin{bmatrix} \frac{1}{E_z} & -\frac{\nu_z}{E_z} & -\frac{\nu_z}{E_z} & 0 & 0 & 0 \\ \frac{\nu_z}{E_z} & \frac{1}{E_z} & \frac{\nu_z}{E_z} & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{\nu_z}{E_z} & -\frac{\nu_z}{E_z} & \frac{1}{E_z} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2G} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2G} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{E_z} \end{bmatrix}$$

Figure 1.2 Expression du tenseur d'élasticité hexagonal et son repère associé

Les tenseurs d'élasticité de l'aluminium, le fer, le nickel, et le titane peuvent être trouvés dans la littérature : Simmons et Wang (1971). Dans ce Handbook, ce sont les composantes du tenseur de rigidité \mathbb{C} en notation de Voigt (cf. annexe 1.1) qui nous sont données (Tableau 1.1).

Tableau 1.1 Constantes des tenseurs d'élasticité cristalline (notation de Voigt)(Simmons et Wang, 1971)

(GPa)	C_{11}	C_{12}	C_{44}	C_{13}	C_{33}
Al	106,75	60,41	28,34	$= C_{12}$	$= C_{11}$
Fe	226	140	116	$= C_{12}$	$= C_{11}$
Ni	248,1	154,9	124,2	$= C_{12}$	$= C_{11}$
Ti	162,4	92	46,7	69	180,7

1.1.3 Angles d'Euler

La représentation par les angles d'Euler est le moyen le plus commun pour définir l'orientation d'un cristal dans un repère de référence. Les angles d'Euler correspondent à trois rotations successives. Différentes conventions existent. La convention présentée ici est la convention de Bunge (Fig. 1.3) :

- Une rotation d'angle φ_1 autour de l'axe Z ;
- Une rotation d'angle Φ autour du nouvel axe X ;

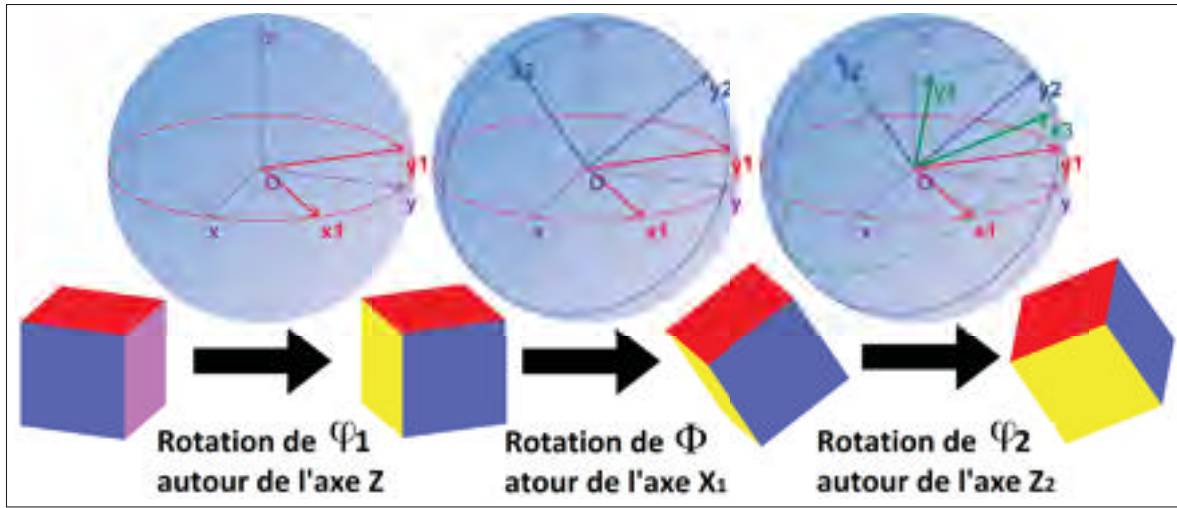


Figure 1.3 Schéma représentatif des angles d'Euler (Tulloue, 2015)

– Une rotation d'angle φ_2 autour du nouvel axe Z.

En annexe 1.3 est donnée la méthode permettant d'effectuer le changement de base du tenseur d'élasticité du repère lié au cristal au repère de référence, et est aussi donnée l'expression du tenseur de changement de base utilisant les angles d'Euler.

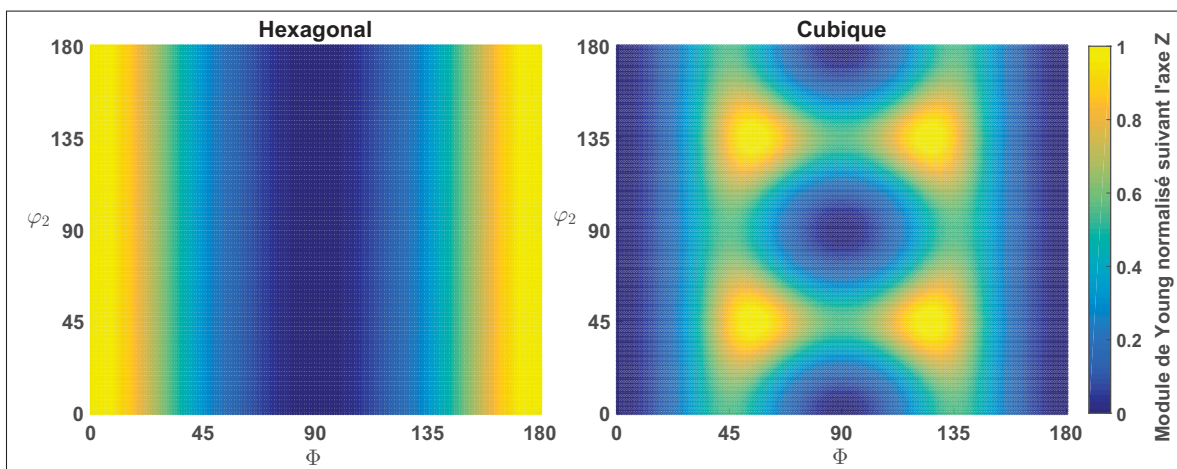


Figure 1.4 Module de Young dans la direction Z en fonction des angles d'Euler Φ et φ_2

Sur la figure 1.4 sont représentés les modules de Young dans la direction Z du cristal en fonction des angles d'Euler Φ et φ_2 (l'angle φ_1 n'a aucune influence sur le module de Young dans la direction Z) pour les mailles de type cubique et hexagonal. Pour rappel le module de Young dans la direction Z du repère dans lequel est exprimé le tenseur de souplesse est égal à l'inverse de la composante 3333 du tenseur de souplesse ($E_z = S_{3333}^{-1}$).

Dans le cas d'un cristal hexagonal, seul l'angle φ_2 influe sur le module de Young dans la direction Z. Il est égal à E_t pour $\Phi = 0^\circ$ et à E_l pour $\Phi = 90^\circ$, et varie entre ces deux valeurs pour différents angles Φ .

Dans le cas d'un cristal cubique, on observe que le module de Young est minimal lorsque la direction Z est perpendiculaire à l'une des faces du cube et de valeur E_{Young} , et est maximal lorsque la direction Z est parallèle à l'une des quatre diagonales du cube d'angle d'Euler (correspondant aux angles d'Euler $[\varphi_1 ; \pm \arctan(1) ; \pm \arctan(\sqrt{2})]$). Cette valeur maximale dépend de toutes les constantes du tenseur d'élasticité cubique (E_{Young} , ν et G). En utilisant les valeurs du tableau 1.1, nous avons dans le cas de l'aluminium le module de Young qui varie de 63,1GPa à 75,6GPa, de 119GPa à 283GPa pour le fer, et de 129GPa à 305GPa pour le nickel. On observe que l'aluminium a une très faible anisotropie ($\frac{2(E_{max}-E_{min})}{E_{max}+E_{min}} = 18\%$) comparé aux deux autres éléments ($\frac{2(E_{max}-E_{min})}{E_{max}+E_{min}} = 82\%$ pour le fer et 81% pour le nickel).

Le matériau choisi dans le cadre de cette maîtrise est essentiellement le Fer, car il présente une forte anisotropie (et par conséquent, il est plus difficile à cerner que l'aluminium). Le tenseur de rigidité cristallin que l'on utilisera est alors le suivant (notation de Pedersen) :

$$\mathbb{C}_{Fe} = \begin{bmatrix} 226 & 140 & 140 & 0 & 0 & 0 \\ 140 & 226 & 140 & 0 & 0 & 0 \\ 140 & 140 & 226 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2 \times 116 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 2 \times 116 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 2 \times 116 \end{bmatrix} \quad (GPa) \quad (1.3)$$

1.2 Calculs d'agrégats polycristallins

Deux écoles de calculs d'agrégats polycristallins se présentent à nous : les modèles analytiques et les modèles numériques. Les méthodes analytiques nous donnent une solution mathématique exacte à un problème. Malheureusement, les calculs d'agrégats polycristallins ne sont pas des problèmes simples qui offrent la possibilité d'avoir une solution mathématique exacte : deux solutions se présentent alors : simplifier le problème afin d'avoir une solution analytique qui se rapproche le plus de notre problème, ou bien utiliser des modèles d'approximation numériques qui sont bien plus demandeur en puissance de calculs, mais qui fournissent une meilleure solution.

De nombreux paramètres sont à considérer dans les calculs d'agrégats : la distribution des tailles de grains, des orientations cristallographiques, les interactions entre les différentes phases de l'alliage, les effets de joint de grain, les effets de surface, les différents phénomènes de déformation (élastique, plastique, visqueux, thermique, etc.), les contraintes résiduelles, les effets de forme, de texture, désorientation cristallographie, effet d'endommagement, formation de fissure, etc. La liste de phénomènes à prendre en compte est très longue. Il est donc très difficile de considérer tous ces paramètres à la fois et des simplifications sont alors nécessaires.

1.2.1 Génération du polycristal

Il est possible à l'aide d'outil de mesure de capturer la microstructure d'un matériau, voir même la tomographie complète d'un matériau en trois dimensions, et de pouvoir comparer par la suite un modèle construit à partir de la tomographie aux essais expérimentaux réalisés sur le matériau. C'est ce qu'on fait différents auteurs (Musienko *et al.*, 2007; Latourte *et al.*, 2013, 2012) dans le but de valider leur modèle et leurs paramètres qui ont été identifiés sur essai macroscopique à l'aide de modèle d'homogénéisation.

1.2.1.1 Génération des grains

Dans le cadre de cette étude, nous nous intéressons à des générations de polycristaux aléatoires. Différentes méthodes existent pour la génération et la distribution des grains d'un polycristal dans l'espace : la méthode la plus courante est la méthode de la mosaïque de Voronoï. Elle consiste à faire germer de façon isotrope et de vitesse égale des grains dispersés de façon aléatoire dans l'espace.

Une autre méthode, moins réaliste, et beaucoup plus régulière, est la structure (ou conjecture) de Kelvin. C'est un réseau périodique de polyèdres à 14 faces possédant 6 faces carrées et 8 faces hexagonales (Fig. 1.5). Tous les polyèdres formant la structure de Kelvin sont identiques : de même taille et de même forme. Du fait que tous les grains ont la même forme et la même taille, la structure de Kelvin permet d'étudier l'influence du voisinage d'un grain sans avoir les problèmes d'effet de forme et de taille entre chaque grain.

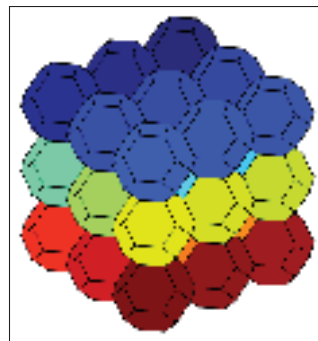


Figure 1.5 Schéma illustrant la structure de Kelvin

1.2.1.2 Méthodes de génération aléatoire des orientations cristallographiques

Il existe différentes méthodes de génération aléatoire d'orientations, mais toutes ne sont pas adaptées au cas des polycristaux. Deux écoles se présentent : celle basée sur les angles d'Euler

(méthode utilisée dans le cadre de la thèse de M. Hamid Pourian (Pourian, 2014)) et celle basée sur les quaternions (méthode utilisée dans le cadre de la thèse de Y. Guilhem (Guilhem, 2011)).

Ce que l'on cherche à obtenir est une distribution bien uniforme des orientations cristallographiques et éviter toute forme de texture. Après comparaison de ces deux méthodes (cf. annexe IV), chacune a montré être bien adaptée à notre problème.

La description et la méthode de génération aléatoire des orientations cristallographiques de ces deux méthodes sont données en annexe IV.

1.2.1.3 Notion de VER

Lors d'une approche micromécanique, il est nécessaire de définir un volume élémentaire représentatif (VER) afin que le comportement effectif du volume considéré ne soit plus affecté par la répartition aléatoire des grains. Soit un polycristal aux dimensions infinies, le VER est la plus petite partition de ce polycristal que l'on peut isoler de telle sorte que le comportement effectif de cette portion reste identique au comportement effectif du polycristal aux dimensions infinies. Ceci revient aussi à dire que nous avons atteint le VER lorsque les propriétés effectives de ce volume n'évoluent plus lorsque les dimensions de ce volume augmentent.

De manière générale, il est estimé qu'une section d'une trentaine de grains est considérée comme suffisante pour avoir un comportement effectif bien homogénéisé d'un polycristal (Forest et Fivel, 2004), mais la notion de VER dépend aussi du modèle de simulation utilisé. T. Kanit (Kanit, 2003) a écrit sa thèse de doctorat sur l'étude de la notion de VER pour les polycristaux à partir de la méthode des ÉF (cf. section 1.2.2). Il a étudié l'influence de l'anisotropie des cristaux, des rapports de formes, des conditions appliquées aux limites du VER, et de bien d'autres paramètres. Il a été conclu qu'il n'existe pas de définition générale de la taille d'un VER, et qu'il est préférable de faire plusieurs évaluations sur différents échantillons et de faire la moyenne des résultats afin d'obtenir les propriétés effectives du matériau.

De plus, le choix des conditions aux limites peut influencer la taille du VER. Utiliser des conditions aux limites périodiques permet de réduire les effets de bords indésirables qui peuvent parasiter la réponse. T. Kanit (Kanit, 2003) a montré que les conditions aux limites périodiques dans le cas d'un polycristal élastique permettent d'atteindre la convergence du comportement effectif plus rapidement que d'autres conditions aux limites, et ont donc pour effet de réduire la taille du VER. C'est le type de conditions aux limites qui sera utilisé dans cette étude.

1.2.1.4 Conditions aux limites

Il existe différents types de conditions aux limites que l'on peut appliquer à notre polycristal et le choix des conditions aux limites dépend de ce que l'on veut observer et de comment le polycristal a été généré.

Les trois types de conditions aux limites les plus communs sont :

- Déformation homogène au contour :

$$u_i = E_{ij}x_j \quad (1.4)$$

où \underline{E} est le tenseur de déformation effectif appliqué au volume, \underline{x} un point du contour du VER, \underline{u} le vecteur déplacement du point \underline{x} .

- Contrainte homogène au contour :

$$\sigma_{ij}n_i = \Sigma_{ij}n_j \quad (1.5)$$

où $\underline{\Sigma}$ est le tenseur de contrainte effectif appliqué au volume, $\underline{\sigma}$ est le tenseur de contrainte en un point \underline{x} du contour du VER, et \underline{n} la normale extérieure au point \underline{x} .

- Conditions périodiques :

$$u_i = E_{ij}x_j + u_i^* \quad (1.6)$$

où \underline{E} est le tenseur de déformation effectif appliqué au volume, \underline{x} un point du contour du VER, \underline{u} le vecteur déplacement du point \underline{x} et \underline{u}^* est le déplacement périodique.

Les conditions aux limites périodiques ici présentées ne permettent pas un contrôle en contrainte du chargement appliqué au VER, mais ont l'intérêt de ne pas avoir d'effet de bord, et par conséquent de réduire la taille du VER. Des méthodes existent pour appliquer des conditions aux limites périodiques pilotées en contrainte, mais sont lourdes en terme de calcul.

Les conditions aux limites périodiques imposent d'avoir un VER périodique : à chaque point appartenant à la surface du VER doit correspondre un point identique sur la surface opposée.

1.2.2 Modèles Numériques : la méthode des Éléments Finis

Les simulations par ÉF sont très utilisées dans le calcul d'agrégat polycristallin. Fabrice Barbe a dédié son doctorat à l'étude numérique d'agrégats polycristallins en utilisant la simulation par ÉF (Barbe, 2000). Au cours de cette étude, il a étudié l'influence de la finesse du maillage d'un grain : plus le maillage est grossier, plus l'on tend vers un comportement de type Taylor (voir V). Yoann Guilhem a quant à lui étudié l'effet de surface et de voisinage sur le comportement cristallin (Guilhem, 2011) : comme il est observé sur des échantillons réels, il a observé lors de ses simulations ÉF que les grains de surface montrent une dispersion de déformation plastique plus importante et qu'ils ont plus tendance à s'éloigner de leur comportement monocristallin que les grains situés au cœur du matériau. En plus de l'effet de surface, il a aussi observé une forte influence du voisinage d'un grain sur son comportement.

Une fois notre agrégat défini (VER, distribution des orientations, des rapports de forme, etc.) (cf. section 1.2.1), il est nécessaire de générer le maillage de ce polycristal : déterminer le type d'élément (tétraédrique ou hexaédrique) et le nombre d'éléments par grains. Ces paramètres dépendent du type de matériau étudié et de ce que l'on veut observer (comportement effectif, comportement moyen par grain, comportement intragranulaire). Dans le cadre de l'étude de F. Barbe (Barbe, 2000) un nombre de 9 éléments quadratiques à 20 nœuds était suffisant pour

étudier le comportement moyen par grain d'un polycristal de 200 grains avec une précision de 1%.

Neper (Quey, 2016) est un logiciel en accès libre (GNU General Public License) qui permet de générer à la fois l'agrégat (en contrôlant les paramètres de microstructure) et le maillage associé.

Il existe différents logiciels utilisant la méthode des éléments finis en mécanique des structures (ABAQUS, ANSYS, ZEBULON, ASTER, CAST3M, etc.). Un accord entre les différents partenaires industriels du projet a été fait pour que le développement des modèles ÉF se fasse sur ANSYS, par conséquent ANSYS sera le logiciel utilisé au cours du projet.

Pour une plus large revue de la littérature sur les méthodologies et les applications des calculs d'agrégats, vous pouvez vous référer aux articles de Roters *et al.* (2010), et Forest *et al.* (2002).

1.2.3 Modèles Analytiques : les modèles d'homogénéisation

Les modèles d'homogénéisation permettent d'évaluer les phénomènes macroscopiques (phénomènes homogénéisés) à partir de comportement microscopique, c'est à dire en prenant en compte les hétérogénéités du matériau (les différentes phases le constituant, les paramètres géométriques, etc.). Leur objectif est donc de remplacer le matériau hétérogène par un matériau équivalent homogène qui aurait les mêmes propriétés mécaniques d'un point de vue macroscopique.

1.2.3.1 Principes de base sur les modèles d'homogénéisation

Les modèles d'homogénéisations se déroulent en 4 étapes : représentation, localisation, comportement local et homogénéisation (Fig. 1.6).

- a. Représentation : cette étape consiste à définir notre matériau. Dans le cadre de notre étude ceci équivaut à définir notre polycristal et tous les paramètres qui le définissent et que l'on

souhaite prendre en compte (cf. section 1.2.1).

- b. Localisation : cette étape consiste à établir une relation entre les déformations/contraintes locales et la déformation/contrainte macroscopique appliquée au polycristal, tel que :

$$\begin{aligned}\underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{x}) &= \mathbb{A}(\underline{x}) : \underline{\underline{E}} \\ \underline{\underline{\sigma}}(\underline{x}) &= \mathbb{B}(\underline{x}) : \underline{\underline{\Sigma}}\end{aligned}\tag{1.7}$$

où $\mathbb{A}(\underline{x})$ et $\mathbb{B}(\underline{x})$ sont respectivement les tenseurs de localisation des déformations et des contraintes au point \underline{x} .

- c. Comportement local : cette étape établit le lien entre la contrainte et la déformation au point \underline{x} . Cette étape peut être considérée comme faisant partie de l'étape de représentation. Dans notre cas simple d'élasticité linéaire, notre loi de comportement local se résume à la loi de Hooke :

$$\begin{aligned}\underline{\underline{\sigma}}(\underline{x}) &= \mathbb{C}(\underline{x}) : \underline{\underline{\varepsilon}} \\ \underline{\underline{\varepsilon}}(\underline{x}) &= \mathbb{S}(\underline{x}) : \underline{\underline{\sigma}}\end{aligned}\tag{1.8}$$

- d. Homogénéisation : étape finale qui a pour but de moyenner et déterminer le comportement effectif

$$\begin{aligned}\underline{\underline{\Sigma}} &= \langle \underline{\underline{\sigma}} \rangle_V \\ \underline{\underline{E}} &= \langle \underline{\underline{\varepsilon}} \rangle_V\end{aligned}\tag{1.9}$$

Les conditions suivantes peuvent en être déduites des équations 1.7 et 1.9 sur les tenseurs de localisation \mathbb{A} et \mathbb{B} :

$$\begin{aligned}\underline{\underline{E}} &= \langle \underline{\underline{\varepsilon}} \rangle_V = \langle \mathbb{A} : \underline{\underline{E}} \rangle_V = \langle \mathbb{A} \rangle_V : \underline{\underline{E}} \rightarrow \langle \mathbb{A} \rangle_V = \mathbb{I} \\ \underline{\underline{\Sigma}} &= \langle \underline{\underline{\sigma}} \rangle_V = \langle \mathbb{B} : \underline{\underline{\Sigma}} \rangle_V = \langle \mathbb{B} \rangle_V : \underline{\underline{\Sigma}} \rightarrow \langle \mathbb{B} \rangle_V = \mathbb{I}\end{aligned}\tag{1.10}$$

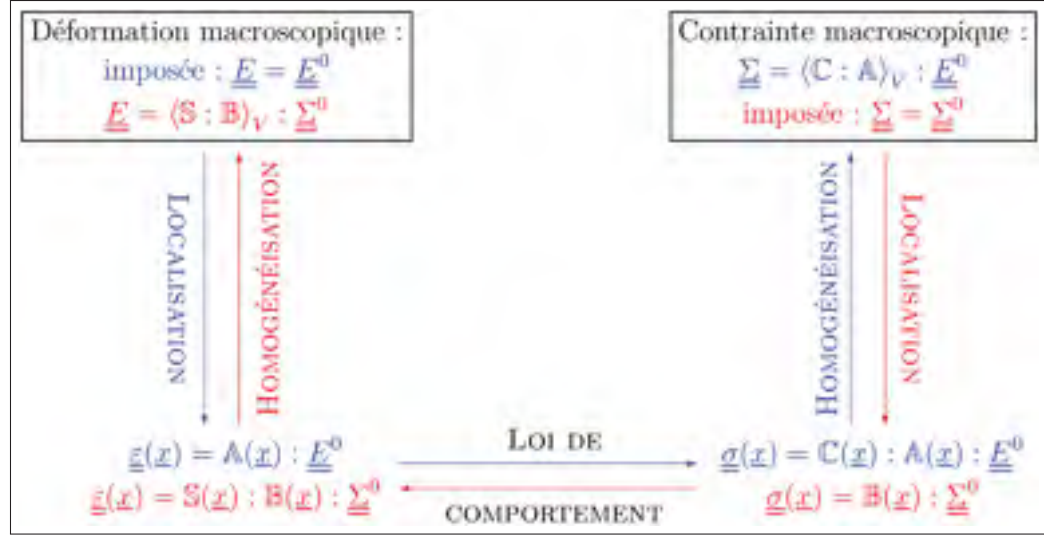


Figure 1.6 Schéma illustrant les différentes étapes des modèles d'homogénéisation pour un chargement en déformation (en bleu) ou un chargement en contrainte (en rouge) (Di Paola, 2010)

et à partir des équations 1.7 et 1.8, les tenseurs effectifs peuvent alors être calculés de la manière suivante :

$$\begin{aligned} \underline{E} &= \langle \underline{\varepsilon} \rangle_V = \langle \underline{S} : \underline{B} : \underline{\Sigma} \rangle_V = \langle \underline{S} : \underline{B} \rangle_V : \underline{\Sigma} \rightarrow \underline{S}^{eff} = \langle \underline{S} : \underline{B} \rangle_V \\ \underline{\Sigma} &= \langle \underline{\sigma} \rangle_V = \langle \underline{C} : \underline{A} : \underline{E} \rangle_V = \langle \underline{C} : \underline{A} \rangle_V : \underline{E} \rightarrow \underline{C}^{eff} = \langle \underline{C} : \underline{A} \rangle_V \end{aligned} \quad (1.11)$$

Si l'on considère le volume V constitué de n phases i de fraction volumique c_i et de tenseur de rigidité/souplesse $\underline{C}^i/\underline{S}^i$, et que l'on s'intéresse au comportement moyen de ces phases, on aurait alors :

$$\begin{aligned} \underline{S}^{eff} &= \langle \underline{S} : \underline{B} \rangle_V = \sum_{i=1}^n c_i \langle \underline{S} : \underline{B} \rangle_{phase\ i} = \sum_{i=1}^n c_i \underline{S}^i : \underline{B}^i \\ \underline{C}^{eff} &= \langle \underline{C} : \underline{A} \rangle_V = \sum_{i=1}^n c_i \langle \underline{C} : \underline{A} \rangle_{phase\ i} = \sum_{i=1}^n c_i \underline{C}^i : \underline{A}^i \end{aligned} \quad (1.12)$$

Dans le cadre de notre problématique de comportement polycristallin, une phase pourrait représenter un grain du polycristal.

Ce qui principalement différencie les modèles d'homogénéisation les uns des autres, c'est la définition des tenseurs de localisation \underline{A} et \underline{B} . Mais la majorité des modèles analytiques re-

posent sur le travail d'Eshelby (Eshelby, 1957) portant sur le comportement d'une inclusion immergée dans un milieu homogène.

1.2.3.2 L'inclusion d'Eshelby

Dans les années 1957 (Eshelby, 1957), J.D. Eshelby s'est intéressé à un ensemble de problèmes sur les champs de déformation/contrainte d'inclusions élastiques ellipsoïdales immergées dans un corps élastique infini.

Il s'est plus particulièrement intéressé au comportement d'une inclusion ellipsoïdale de tenseur d'élasticité \mathbb{C}^I insérée dans une matrice infinie soumise à un chargement uniforme de tenseur élastique \mathbb{C}^M . Le problème peut se diviser en deux sous-problèmes :

- Soit une inclusion subissant une déformation libre $\underline{\underline{\epsilon}}^*$. Cette déformation libre est indépendante de la matrice, et elle peut être assimilée à une dilatation thermique, ou bien une déformation liée à des propriétés électriques, ou bien une déformation plastique locale. L'inclusion et la matrice ont les mêmes propriétés élastiques ($\mathbb{C}^I = \mathbb{C}^M = \mathbb{C}$) et l'ensemble n'est sous l'effet d'aucun chargement extérieur ($\underline{\underline{E}} = 0$ et $\underline{\underline{\Sigma}} = 0$). Due à la déformation libre, la matrice va exercer une force d'accommodation sur cette inclusion (Fig. 1.7) de telle sorte que :

$$\begin{aligned}\underline{\underline{\sigma}}^M &= \mathbb{C} : \underline{\underline{\epsilon}}^M && \text{dans la matrice} \\ \underline{\underline{\sigma}}^I &= \mathbb{C} : (\underline{\underline{\epsilon}}^I - \underline{\underline{\epsilon}}^*) && \text{dans l'inclusion}\end{aligned}\tag{1.13}$$

J.D. Eshelby a alors défini un tenseur d'ordre 4, appelé le tenseur d'Eshelby, qui relie la déformation libre et la déformation résultant de l'accommodation de l'inclusion dans la matrice suivant l'équation suivante :

$$\underline{\underline{\epsilon}}^I = \mathbb{S}_E : \underline{\underline{\epsilon}}^*\tag{1.14}$$

Le tenseur d'Eshelby ne dépend que de la forme de l'inclusion et des propriétés élastiques de la matrice.

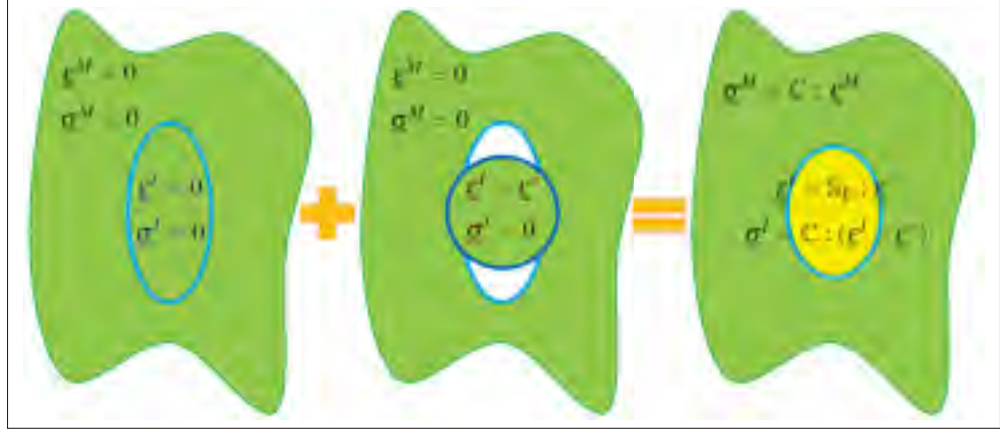


Figure 1.7 Illustration du problème d'Eshelby : partie 1

Dans le cas d'une inclusion sphérique immergée dans une matrice isotrope, le tenseur d'Eshelby peut s'exprimer de la manière suivante :

$$S_E = \frac{(1+\nu)}{3(1-\nu)} \mathbb{J} + \frac{2(4-5\nu)}{15(1-\nu)} \mathbb{K} \quad (1.15)$$

où ν est le coefficient de poisson de la matrice et \mathbb{J} et \mathbb{K} sont les projecteurs isotropes tel que (notation de Pedersen) :

$$\mathbb{J} = \frac{1}{3} \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad \text{et} \quad \mathbb{K} = \frac{1}{3} \begin{bmatrix} 2 & -1 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 2 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & -1 & 2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 3 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 3 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 3 \end{bmatrix} \quad (1.16)$$

- Si l'inclusion a des propriétés élastiques différentes de la matrice ($\mathbb{C}^I \neq \mathbb{C}^M$), est sans déformation libre ($\epsilon^* = 0$), et est soumise à un chargement à l'infini (E, Σ) alors, dû au chargement extérieur et à leur incompatibilité élastique, l'ensemble inclusion-matrice va générer une dé-

formation d'accommodation $\underline{\varepsilon}^{acc}$ (Fig. 1.8) tel que :

$$\begin{aligned}\underline{\underline{\sigma}}^M &= \mathbb{C}^M : (\underline{\underline{E}} + \underline{\underline{\varepsilon}}^{acc}) && \text{dans la matrice} \\ \underline{\underline{\sigma}}^I &= \mathbb{C}^I : (\underline{\underline{E}} + \underline{\underline{\varepsilon}}^{acc}) && \text{dans l'inclusion}\end{aligned}\quad (1.17)$$

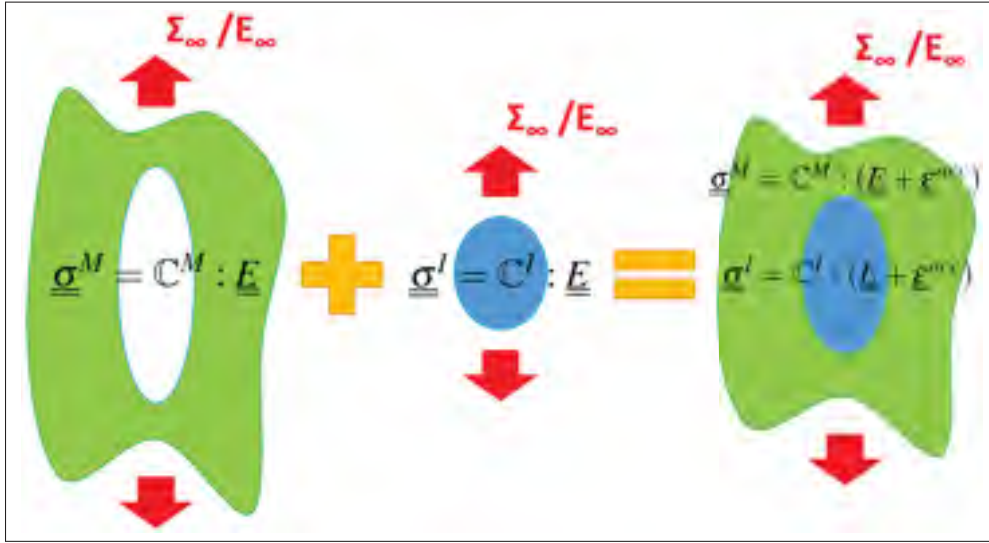


Figure 1.8 Illustration du problème d'Eshelby : partie 2

- Pour conclure, si l'on reprend le premier problème (inclusion de mêmes propriétés élastiques, ayant une déformation libre $\underline{\underline{\varepsilon}}^*$) et qu'on y applique une contrainte extérieure, on aura alors :

$$\begin{aligned}\underline{\underline{\sigma}}^M &= \mathbb{C} : (\underline{\underline{E}} + \underline{\underline{\varepsilon}}^{acc}) && \text{dans la matrice} \\ \underline{\underline{\sigma}}^I &= \mathbb{C} : (\underline{\underline{E}} + \underline{\underline{\varepsilon}}^{acc} - \underline{\underline{\varepsilon}}^*) && \text{dans l'inclusion}\end{aligned}\quad (1.18)$$

avec $\underline{\underline{\varepsilon}}^{acc} = \mathbb{S}_E : \underline{\underline{\varepsilon}}^*$.

Pour que les deux problèmes conduisent aux mêmes contraintes dans l'inclusion (Eq. 1.17 et 1.18) on doit alors avoir :

$$\underline{\underline{\sigma}}^I = \mathbb{C}^I : (\underline{\underline{E}} + \underline{\underline{\varepsilon}}^{acc}) = \mathbb{C}^M : (\underline{\underline{E}} + \underline{\underline{\varepsilon}}^{acc} - \underline{\underline{\varepsilon}}^*) \quad (1.19)$$

$$\Rightarrow \underline{\underline{\varepsilon}}^* = [(\mathbb{C}^M - \mathbb{C}^I) : \mathbb{S}_E - \mathbb{C}^M]^{-1} : (\mathbb{C}^I - \mathbb{C}^M) : \underline{\underline{E}} \quad (1.20)$$

On a donc alors la déformation totale dans l'inclusion qui peut s'écrire de la manière suivante :

$$\underline{\underline{\epsilon}}^I = \underline{\underline{E}} + \mathbb{S}_E : \underline{\underline{\epsilon}}^* = \underline{\underline{E}} + \mathbb{S}_E : [(\mathbb{C}^M - \mathbb{C}^I) : \mathbb{S}_E - \mathbb{C}^M]^{-1} : (\mathbb{C}^I - \mathbb{C}^M) : \underline{\underline{E}} = \mathbb{A}_E : \underline{\underline{E}} \quad (1.21)$$

$$\text{avec (après simplification)} \quad \mathbb{A}_E = (\mathbb{I} + \mathbb{S}_E : \mathbb{C}^{M-1} : (\mathbb{C}^I - \mathbb{C}^M))^{-1} \quad (1.22)$$

Le tenseur \mathbb{A}_E est donc le tenseur de localisation dépendant des propriétés mécaniques de la matrice (\mathbb{C}^M), des propriétés mécaniques de l'inclusion (\mathbb{C}^I), et de la forme de l'inclusion (\mathbb{S}_E). Une méthode de calcul du tenseur d'Eshelby \mathbb{S}_E pour le cas général d'une inclusion ellipsoïdale dans une matrice quelconque est donnée en annexe 1.2.3.2).

1.2.3.3 Modèles d'homogénéisation usuels

À partir de la solution du problème de l'inclusion d'Eshelby il est possible de déterminer le tenseur de localisation qui permet de relier le tenseur de déformation/contrainte effectif au tenseur de déformation/contrainte local. Ce qui différencie principalement les modèles les uns des autres est la définition du tenseur de rigidité de la matrice \mathbb{C}^M .

- a. Solution diluée : cette méthode est juste la solution brute du problème d'Eshelby. Prenons un matériau composite avec des renforts de tenseur de rigidité \mathbb{C}^I en concentration faible dans une matrice de tenseur de rigidité \mathbb{C}^M . D'après la solution diluée on aurait alors :

$$\begin{aligned} \mathbb{A}_E &= (\mathbb{I} + \mathbb{S}_E : \mathbb{C}^{M-1} : (\mathbb{C}^I - \mathbb{C}^M))^{-1} && \text{pour les renforts} \\ \mathbb{A}_E &= \mathbb{I} && \text{pour la matrice} \end{aligned} \quad (1.23)$$

- b. Mori-Tanaka (Mori et Tanaka, 1973; Benveniste, 1987) : Ce modèle est une variante de la solution diluée mieux adaptée au composite où la matrice est présente en forte proportion dans le matériau. Soit $\underline{\underline{\epsilon}}^M$ la déformation engendrée dans la matrice par le chargement appliqué au matériau. Dans ce modèle on prend l'hypothèse que le chargement que voit

les phases autres que la matrice est le tenseur de déformation de la matrice $\underline{\underline{\epsilon}}^M$ tel que :

$$\underline{\underline{\epsilon}}_E^i = (\mathbb{I} + \mathbb{S}_E : \mathbb{C}^{M-1} : (\mathbb{C}^i - \mathbb{C}^M))^{-1} : \underline{\underline{\epsilon}}^M = \mathbb{T}^i : \underline{\underline{\epsilon}}^M \quad (1.24)$$

Comme la moyenne des tenseurs de déformation de chaque phase doit être égale au tenseur effectif, on peut alors déduire le tenseur de localisation de la matrice \mathbb{A}^M :

$$\underline{\underline{E}} = \langle \underline{\underline{\epsilon}}^i \rangle_i = \sum_{i=1}^n c_i \mathbb{T}^i : \underline{\underline{\epsilon}}^M \rightarrow \underline{\underline{\epsilon}}^M = \left(\sum_{i=1}^n c_i \mathbb{T}^i \right)^{-1} : \underline{\underline{E}} = \mathbb{A}^M : \underline{\underline{E}} \quad (1.25)$$

En couplant les deux équations précédentes on en déduit ensuite le tenseur de localisation de chacune des autres phases :

$$\mathbb{A}^i = (\mathbb{I} + \mathbb{S}_E : \mathbb{C}^{M-1} : (\mathbb{C}^i - \mathbb{C}^M))^{-1} : \left(\sum_{i=1}^n c_i \mathbb{T}^i \right)^{-1} \quad (1.26)$$

- c. Auto-cohérent (Hill, 1965b) : En élasticité linéaire le modèle Auto-cohérent (SC : Self-Consistent) est un modèle relativement et très bien adapté au matériau n'ayant pas de phase dominante ce qui est le cas des polycristaux. Le principe du schéma SC est de considérer la matrice du problème d'Eshelby comme étant le matériau effectif. On aurait alors ainsi :

$$\mathbb{A}_E^i = \left(\mathbb{I} + \mathbb{S}_E^i : \mathbb{C}^{eff-1} : (\mathbb{C}^i - \mathbb{C}^{eff}) \right)^{-1} \quad (1.27)$$

Les études réalisées dans la suite de ce document ne traitent que le problème des champs de déformation élastique linéaire, par conséquent les modèles non-linéaires ne sont pas abordés ici. Dans l'optique de poursuivre le travail de ce document en élastoplasticité, une revue de la littérature a tout de même été faite en annexe (cf. annexe V) sur les modèles auto-cohérent développés pour l'étude du comportement plastique des polycristaux.

- d. Bornes de Voigt et de Reuss : ce sont des bornes supérieures et inférieures du comportement effectif du matériau. Dans le cas de Voigt, toutes les phases ont pour déformation la déformation effective :

$$\underline{\underline{\epsilon}}^i = \underline{\underline{E}} \iff \mathbb{A}^i = \mathbb{I} \quad (1.28)$$

Dans le cas de Reuss, toutes les phases ont pour contrainte la contrainte effective :

$$\underline{\underline{\sigma}}^i = \underline{\underline{\Sigma}} \iff \mathbb{B}^i = \mathbb{I} \quad (1.29)$$

- e. Bornes de Hashin et Shtrikman (Hashin et Shtrikman, 1963) : ces bornes sont connues pour donner des intervalles de solution plus serrés que les bornes de Voigt et Reuss. Elle s'applique à un matériau supposé avoir un comportement macroscopique isotrope. Soit \mathbb{C}^{min} et \mathbb{C}^{max} respectivement les tenseurs de rigidité le plus souple et le plus rigide, tel que :

$$\left(\underline{\underline{E}} : \mathbb{C}^{min} : \underline{\underline{E}} \right) \leq \left(\underline{\underline{E}} : \mathbb{C}^i : \underline{\underline{E}} \right) \leq \left(\underline{\underline{E}} : \mathbb{C}^{max} : \underline{\underline{E}} \right) \quad (1.30)$$

Le principe d'Hashin et Shtrikman est alors d'appliquer la solution diluée et d'affecter à la matrice le tenseur de rigidité \mathbb{C}^{max} pour la borne supérieure, et \mathbb{C}^{min} pour la borne inférieure.

Pour plus de détails sur les différents modèles d'homogénéisation existants, les ouvrages Bornert *et al.* (2001) et Nemat-Nasser et Hori (1999) sont d'excellentes sources d'informations.

1.2.4 Modèles divers

Le problème des modèles décrits précédemment est l'absence d'interactions directes entre grains voisins. Ces modèles s'intéressent principalement au comportement moyen et non aux conditions extrêmes qui peuvent être observées localement et qui sont très critiques en fatigue. Tous les grains ayant la même orientation cristallographique vont avoir le même comportement. Or il est évident qu'un grain entouré de grains durs ne va pas avoir la même réponse qu'un grain de même orientation entouré de grains mous.

- G.B. Sarma a repris le modèle de Taylor, mais en définissant un voisinage pour chacun des grains, et corrige le tenseur de rigidité de chaque grain relativement au tenseur de rigidité des grains voisins (Sarma et Dawson, 1996). L'idée est similaire à celle employée dans le

cadre des automates cellulaires (voir partie 1.2.5).

- Modèle basé sur la théorie de l’inclusion d’Eshelby (voir partie 1.2.3.2) :

De nombreuses études ont découlé du travail d’Eshelby. Kun Zhou a récemment fait une revue des travaux récents sur les inclusions (Zhou *et al.*, 2013). De nombreux modèles très complexes y sont exposés, dont des modèles d’interaction inclusion-inclusion (donc grain-grain), mais aussi des problématiques d’inclusion en surface (hémisphérique). La problématique d’une inclusion dans un demi-espace sous un chargement de contact y est abordée, ce qui se rapproche fortement à une problématique de nano-indentation ou bien de grenailage (Zhou *et al.*, 2011).

- La méthode de Transformation de Fourier rapide (Fast Fourier Transformation, FFT) développée tout d’abord pour des composites (Moulinec et Suquet, 1998), puis pour des polycristaux (Lebensohn, 2001), permet tout comme la méthode des éléments finis de calculer la contrainte et déformation des champs locaux d’une microstructure 3D. En comparaison aux ÉF, les FFT pour le calcul d’agrégat polycristallin périodique seraient plus rapides pour une précision de calcul identique.

Contrairement aux ÉF où la finesse du maillage peut varier d’un point à l’autre du VER, dans le cas des FFT une discrétisation uniforme de la microstructure en éléments cubiques de taille égale (appelés voxels) est nécessaire.

L’avantage principal des FFT est le passage dans le domaine de Fourier et l’utilisation du produit de convolution qui simplifie le calcul d’intégrales ou de dérivées partielles ce qui engendre une réduction du temps de calcul.

1.2.5 Automates cellulaires

L’objectif des modèles d’homogénéisation est d’identifier les propriétés effectives, c’est à dire dans notre cas les tenseurs \mathbb{C}^{eff} et \mathbb{S}^{eff} . Malheureusement, les modèles présentés précédemment n’ont pas pour objectif de capturer les champs de déformation/contrainte locale. La plu-

part de ces modèles ne prennent pas en compte les hétérogénéités locales qui font qu'au sein même d'une phase i on peut observer différents comportements à différents endroits dus à un environnement différent.

L'objectif des automates cellulaires (AC) est donc de prendre en compte ces hétérogénéités locales qui permettent de différencier le comportement de deux grains de même orientation cristallographique, mais ayant un voisinage différent.

1.2.5.1 Principes des AC

Un automate cellulaire est un ensemble de cellules dont le comportement de chacune de ces cellules dépend de celui des cellules voisines.

Il y a quatre éléments importants qui définissent un automate cellulaire :

- Le nombre de cellules : il permet de définir les dimensions de l'automate.
- Les variables d'états de chacune des cellules. Ces variables d'état peuvent avoir un état initial et peuvent évoluer au cours de la simulation. Dans notre cas d'agrégat polycristallin, ces informations seraient donc les orientations cristallographiques, le tenseur de rigidité, la limite élastique, écrouissage, l'état de déformation/contrainte, etc.
- Le voisinage : pour chacune des cellules, un ensemble de cellules appelé "cellule voisine" est défini. Le comportement de chacune des cellules va dépendre du comportement de chacune de ses propres cellules voisines.
- Une loi de comportement local est alors définie afin d'établir l'évolution des variables d'états en fonction des variables d'états des cellules voisines. Soit X_n un vecteur définissant l'état de la cellule i à l'incrément n , on aurait alors :

$$X_{n+1}^i = f(\{X_n^{iv}\}) \quad (1.31)$$

où f est la règle locale et $\{X_n^{iv}\}$ est l'ensemble des variables d'état des cellules voisines de la cellule i .

Les automates cellulaires sont appliqués dans différents domaines d'application : en biologie, en thermodynamique, en métallurgie, en mécanique, en informatique, en sociologie, etc.

Dans le domaine des matériaux, la méthode des AC est très utilisée pour l'étude de cristallisation de microstructure. Meakin (1998) a fait des études afin de développer un modèle pour simuler la germination lors de la déformation et recristallisation dynamique de cristaux. A. Zhao (Zhao *et al.* (2009)) a par la suite poussé son travail plus loin avec l'étude de certains modèles couramment utilisés et l'introduction de nouveaux modèles d'automate cellulaire pour l'étude de germination de cristaux dendritiques.

Montheillet quant à lui a proposé un modèle d'AC applicable au comportement mécanique des polycristaux biphasés (Montheillet et Gilormini, 1996). Son modèle, similaire au modèle d'homogénéisation auto-cohérent, prend en compte différents paramètres de microstructure : la taille des grains, leur écrouissage et adoucissement morphologique. Ce modèle a par la suite été appliqué à l'étude d'alliage de titane biphasé (Montheillet (2004)).

Le travail de Montheillet et Gilormini (1996) a par la suite été repris au sein du LOPFA par Boutana (2009) et plus récemment par Pourian (2014) afin de l'appliquer à l'étude du comportement mécanique d'un alliage de titane en fatigue-fluage.

1.2.5.2 Définition du réseau

Définir le réseau de cellules revient presque à définir le voisinage de chaque cellule.

En 2D les types de réseau les plus couramment utilisés sont les pavages triangulaires (3 ou 12 voisins), carrés (4 ou 8 voisins), ou bien dans notre cas hexagonal (6 voisins). Pour le cas 3D, la structure de Kelvin est la plus souvent utilisée (8 ou 14 voisins). Les maillages présentés sur la figure 1.9 ne sont que des cas réguliers de la répartition dans l'espace les cellules.

Dans les faits, un type de voisinage peut être défini pour chacune des cellules. Il est donc possible de générer des réseaux (et donc dans notre cas des microstructures) plus complexes, par exemple des gradients de microstructure.

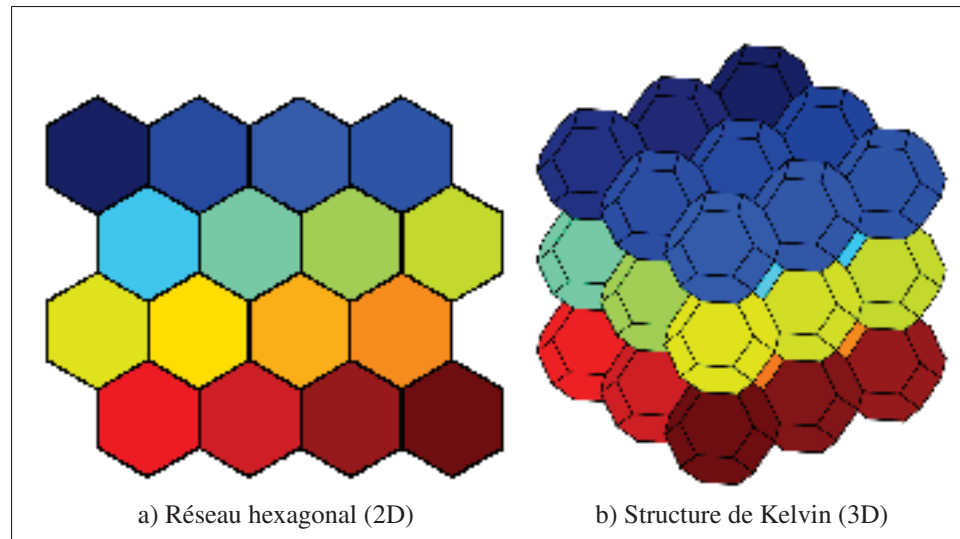


Figure 1.9 Différents types de pavage pour automate cellulaire

Ce qui définit les bords du réseau, c'est la définition du voisinage des cellules situées au bord du réseau. Par exemple, le voisinage peut être défini de telle sorte que le réseau va être périodique : dans le cas d'un réseau régulier (hexagonal, ou structure de Kelvin) les cellules situées sur un bord vont être considérées comme étant à côté de celle du bord opposé.

1.2.5.3 Résumé du travail de M. Hamid Pourian

À partir de cette idée de voisinage d'une cellule influençant sur son comportement, des modèles mécaniques en ont découlé pour l'étude comportemental de matériau. Pourian (2014) a travaillé sur la mise au point d'un automate cellulaire pour l'étude en fatigue-fluage d'alliage de Titane. Dans cette partie nous parlerons seulement de l'étude en élasticité linéaire qui a été faite. Voici les différents éléments à savoir sur l'AC de M. Hamid Pourian en élasticité linéaire :

- Une cellule représentait un grain du polycristal.
- Ce modèle est élaboré pour le cas d'un chargement uniaxial en traction de contrainte Σ_{33} .
- Un réseau hexagonal était utilisé.
- Pour chaque cellule du réseau, un voisinage de 6 cellules était considéré : les 6 cellules les plus proches.

- Le tenseur effectif était calculé en faisant la moyenne des tenseurs de rigidité de chacune des cellules exprimées dans le repère de référence :

$$\underline{\underline{\Sigma}} = \mathbb{S}^{eff} : \underline{\underline{E}} = \left\langle \mathbb{S}_{ref}^C \right\rangle_C : \underline{\underline{E}} \quad (1.32)$$

- Son modèle consistait à utiliser le tenseur de localisation de l'inclusion d'Eshelby (Équation 1.22) où le tenseur de la matrice \mathbb{C}^M est un tenseur isotrope ayant comme coefficient de Poisson le coefficient de poisson effectif et comme module de Young la moyenne des modules de Young dans la direction de chargement des 6 cellules voisines.
- Les tenseurs de localisation de chaque cellule n'étant pas construit de sorte que leur moyenne soit égale au tenseur d'identité \mathbb{I} (Équation 1.10), différents facteurs de correction ont du être appliqués : un facteur de correction afin d'assurer la correspondance entre la moyenne des tenseurs de déformation locaux et le tenseur de déformation effectif :

$$\varepsilon_i^C = \left\langle h_i^C \right\rangle_C \varepsilon_i^C \text{ où } h_i^C = \frac{E_i}{\varepsilon_i^C} \quad (1.33)$$

puis un facteur de correction de sorte que la moyenne des contraintes dans la direction du chargement soit égale au chargement :

$$\underline{\underline{\sigma}}^C = \frac{\Sigma_{33}}{\left\langle \sigma_{33}^C \right\rangle_C} \underline{\underline{\sigma}}^C \quad (1.34)$$

Pour résumer, voici l'algorithme complet :

Algorithme 1.1 Algorithme de l'automate cellulaire de M. Hamid Pourian en élasticité

Entrées : $\underline{\Sigma} = [0; 0; \Sigma_{33}; 0; 0; 0]$, $\mathbb{C}^{cristal}$, géométries, $(\varphi_1^C; \phi^C; \varphi_2^C)$

Sorties : $\underline{\sigma}^C$ et $\underline{\varepsilon}^C$

début

pour *chacune des N cellules C faire*

Changement de base (du repère cristallin au repère de référence (cf. annexe 1.3)) : $\mathbb{C}^{cristal} \xrightarrow{(\varphi_1^C; \phi^C; \varphi_2^C)} \mathbb{C}^C$;

$$\mathbb{C}^C \implies E_{Young\ 33}^C;$$

fin

$$\mathbb{C}^{eff} = \langle \mathbb{C}^C \rangle_C \implies v^{eff};$$

$$\underline{E} = \mathbb{C}^{eff\ -1} : \underline{\Sigma};$$

$$\mathbb{S}_E = \frac{(1+v^{eff})}{3(1-v^{eff})}\mathbb{J} + \frac{2(4-5v^{eff})}{15(1-v^{eff})}\mathbb{K};$$

pour *chacune des N cellules C faire*

$$E_{Young}^M = \left\langle E_{Young\ 33}^C \right\rangle_{6\text{ cellules voisines}};$$

$$(E_{Young}^M; v^{eff}) \implies \mathbb{C}_{Isotrope}^M;$$

$$\mathbb{A}_E^C = \left(\mathbb{I} + \mathbb{S}_E : \mathbb{C}_{Isotrope}^{M-1} : (\mathbb{C}^C - \mathbb{C}_{Isotrope}^M) \right)^{-1};$$

$$\underline{\varepsilon}^C = \mathbb{A}_E^C : \underline{E};$$

$$h_i^C = \frac{E_{ii}}{\varepsilon_{ii}^C} \ (i \in 1, 2, 3);$$

fin

pour *chacune des N cellules C faire*

$$\varepsilon_{ii}^C = \langle h_i^C \rangle_C \varepsilon_{ii}^C \ (i \in 1, 2, 3);$$

$$\underline{\sigma}^C = \mathbb{C}^C : \underline{\varepsilon}^C;$$

$$\underline{\underline{\sigma}}^C = \frac{\Sigma_{33}}{\langle \sigma_{33}^C \rangle_C} \underline{\underline{\sigma}}^C;$$

fin

fin

1.3 Plasticité cristalline

Une revue de littérature a été faite sur la plasticité cristalline dans l'optique de mener une étude élastoplastique. Au vu de l'intérêt que l'étude élastique a porté, cette étude n'a pas été réalisée dans le cadre de ce mémoire.

La revue de littérature ayant tout de même été faite, elle a été rajoutée en fin de ce rapport en annexe (cf. annexe VI).

1.4 Résumé

Dans cette revue de littérature ont été présentées les bases nécessaires à la compréhension de l'élasticité cristalline et les éléments qui nous permettent de définir un agrégat cristallin. Différentes méthodes de simulation ont été exposées (numérique et analytique). La méthode des ÉF est la méthode par excellence en calcul d'agrégat, mais requiert une lourde puissance numérique. D'où la nécessité d'utiliser des modèles analytiques pour obtenir des résultats, peut être moins précis, mais plus rapidement, nécessaires pour simuler des chargements multiples et complexes, et générer des banques de données.

De nombreux modèles d'homogénéisations existent afin de pouvoir déterminer le comportement macroscopique d'un matériau à partir de ses hétérogénéités microscopiques. Mais ces modèles n'ont pas pour but de déterminer le comportement local avec grande précision. Les AC ont l'intérêt de considérer les hétérogénéités locales afin de pouvoir déterminer les configurations de microstructure critique qui sont à éviter, afin d'améliorer les propriétés du matériau.

L'état actuel du modèle d'AC développé au sein du laboratoire n'est pas convaincant en élasticité. Même si le modèle actuel a pour particularité de considérer les effets de voisinage, le modèle est bien trop simpliste pour être réaliste. Il ne prend pas en compte les hétérogénéités au sein de ce voisinage, mais ne fait que moyenner les propriétés des grains voisins. Il est donc nécessaire d'apporter des modifications ou bien de redéfinir le modèle des AC en élasticité linéaire.

Pour cela, une étude par la méthode des ÉF sera faite afin d'étudier l'influence du voisinage des grains sur leur comportement local. Comme il a été dit précédemment, beaucoup de paramètres sont à prendre en compte. Le problème a été réduit seulement à l'étude de l'influence des orientations cristallographiques et de leur distribution dans le voisinage d'un grain sur son comportement. Tous les facteurs de forme et de taille seront ignorés. Pour valider ces hypothèses, la structure de Kelvin (Fig. 1.5) pourra être alors utilisée pour générer l'agrégat cristallin.

Une fois l'étude de l'influence du voisinage des grains sur leur comportement réalisé, un nouveau modèle d'AC sera défini et comparé aux résultats obtenus par simulation ÉF.

CHAPITRE 2

ÉTUDE ÉLÉMENTS FINIS

La méthode de calcul par éléments finis est une méthode très utilisée dans les études comportementales des polycristaux. Ces études sont généralement faites sur un cube d'éléments où chaque élément appartient à un grain du polycristal.

Dans le cadre de notre étude, la méthode de simulation par éléments finis est utilisée comme référence et sera par la suite comparée aux résultats de notre modèle analytique.

Ce chapitre se divise en deux parties. Tout d'abord, nous définissons l'agrégat cristallin (méthode de maillage de la structure de Kelvin, application des conditions aux limites, dimension du VER) pour ensuite faire des simulations de polycristaux en traction. Puis dans un second temps sont présentées les études de l'influence du voisinage des grains sur leur comportement et les observations faites.

Dans les paragraphes qui suivent, toutes les orientations cristallographiques aléatoires ont été générées par la méthode des quaternions (Annexe IV), et le tenseur élastique cristallin utilisé est celui du Fer (Équation 1.3). Toutes les simulations faites au cours de cette étude sont réalisées en élasticité linéaire.

2.1 Calcul d'agrégat cristallin par la méthode des ÉF

2.1.1 Définition et méthode de maillage de la structure de Kelvin

La structure de Kelvin est un réseau périodique de polyèdres à 14 faces possédant 6 faces carrées et 8 faces hexagonales (Fig. 1.5). Tous les polyèdres formant la structure de Kelvin sont identiques : de même taille et de même forme. La structure de Kelvin permet donc d'étudier l'influence du voisinage en s'affranchissant des effets des différents rapports de forme et de taille entre les grains.

Comme l'on veut que chaque grain soit parfaitement identique, il est donc possible de mailler seulement un grain puis de le dupliquer par translation dans tout l'espace afin de créer notre structure de Kelvin.

Afin de pouvoir imposer des conditions aux limites périodiques (Section 2.1.3), à chaque situé sur une face du cube doit correspondre un nœud identique sur la face opposée. La cellule située en coin de cube est divisée en 8 parties : ce huitième de cellule sera utilisé comme motif pour former une cellule de Kelvin et la structure entière tout en conservant notre périodicité sur les bords du cube.

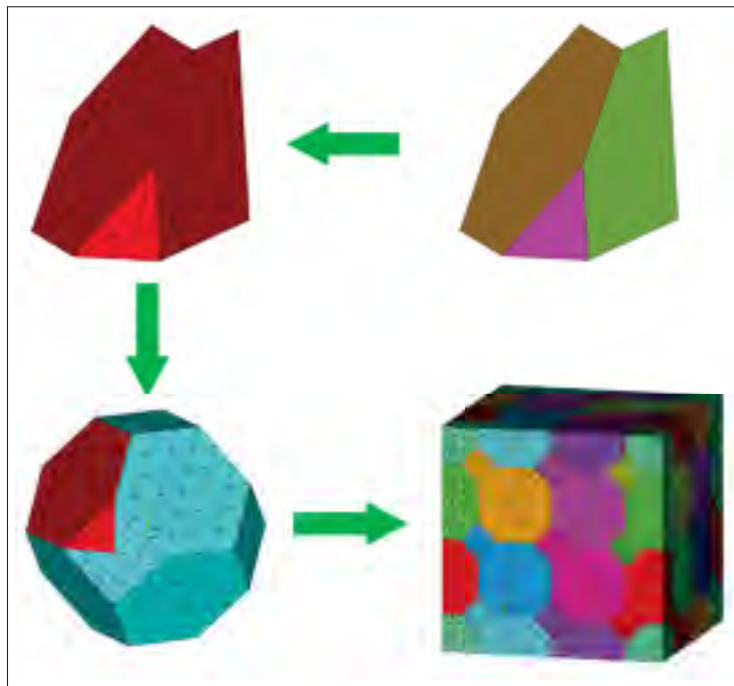


Figure 2.1 Schéma illustrant les étapes de la construction de la structure de Kelvin

Le maillage de la structure de Kelvin se fait en 4 étapes (Figure 2.1) :

La première étape consiste à générer les trois faces élémentaires de la cellule. Comme nous voulons mailler un cube en structure de Kelvin les cellules situées en coin de cube seront alors divisées en un huitième. Dans ce huitième de cellule, trois types de face se distinguent : une

face triangulaire, une face hexagonale, et une face pentagonale. C'est donc à partir de ces trois faces que notre cellule de Kelvin va être construite.

Dans la seconde étape, la cellule de Kelvin est maillée : les trois faces sont maillées, puis dupliquées par symétrie et/ou rotation et/ou translation afin de conserver la périodicité de la cellule. Lorsque les faces sont dupliquées, des doublons de nœuds ont été générés, ils doivent donc être supprimés. Une fois les faces dupliquées, maillées et soudées entre elles, le volume de la cellule est alors maillé. Des éléments tétraédriques à 4 nœuds (SOLID285 dans ANSYS) ou à 10 nœuds (SOLID187 dans ANSYS) sont utilisés pour le maillage. Le maillage de la cellule peut être contrôlé par différents paramètres :

- Le nombre d'éléments sur chaque côté de chacune des faces, donc 3 variables (côtés de la face hexagonale, triangulaire et pentagonale) ;
- L'aire des éléments situés sur les faces de la cellule : le nombre d'éléments par face peut être contrôlé en ajustant l'aire des éléments en fonction de la dimension des faces de la cellule ;
- Le gradient d'éléments dans le volume : la densité d'éléments dans le volume peut être contrôlée afin d'avoir un maillage plus fin ou plus grossier que le maillage en surface.

La troisième et dernière étape consiste à dupliquer la cellule entièrement maillée dans tout notre espace. De la même manière que pour la duplication des faces, des doublons de nœuds sont générés, et sont alors supprimés. Les cellules situées sur les bords de l'espace sont découpées afin de former un cube. Ainsi les faces opposées sont parfaitement symétriques et chaque cellule est maillée de manière parfaitement identique. Le nombre de cellules dupliquées dépend du nombre nécessaire à la définition du VER (Section 2.1.2).

Des ensembles d'éléments sont définis pour chaque cellule du cube auxquels sont attribués un système de coordonnées (lié à l'orientation cristallographique de la cellule) et des propriétés matériaux (dans notre cas, ce sont les propriétés du cristal de fer 1.3).

2.1.2 VER

Dans le cadre de l'étude de Pourian (2014) et ses simulations ÉF, des agrégats composés de 500 grains ont été utilisés. Barbe (2000), en utilisant la mosaïque de Voronoï, a estimé qu'un VER de 200 grains d'orientations aléatoires permet d'obtenir un comportement effectif isotrope à 5% près, et à 1% près avec 500 grains. De plus, des conditions aux limites périodiques sont appliquées et Kanit (2003) a montré que les conditions aux limites périodiques dans le cas d'un polycristal élastique permettent d'atteindre la convergence du comportement effectif plus rapidement que d'autres conditions aux limites, et ont donc pour effet de réduire la taille du VER.

Comme la structure de Kelvin nous impose le nombre de grains par tranche du fait de sa géométrie ($2 \times a^3$) nous avons le choix entre 432 ou 686 grains par cube. Atteindre le VER avec précision n'étant pas notre objectif principal, et comme notre étude est de nature statistique, et que les calculs sont purement élastiques et par conséquent rapides, un VER de 686 grains est donc utilisé tout au long de cette étude afin d'être sûr de bien être dans le VER.

2.1.3 Conditions aux limites

Dans le cadre de notre étude des conditions aux limites périodiques ont été choisies et imposées à notre cube polycristallin afin que les simulations ÉF soient parfaitement similaires aux simulations réalisées par modèle analytique, en plus du fait qu'elles permettent de réduire la taille du VER.

Les conditions aux limites périodiques imposent d'avoir un maillage adapté : à chaque nœud appartenant à une face du cube doit correspondre sur la face opposée un nœud de position identique (c'est à dire ayant deux de leurs coordonnées égales). Ces conditions ont bien été respectées lors du maillage de la structure de Kelvin (Section 2.1.1).

Le champ de déplacement appliqué au cube de volume V prend la forme suivante en tout point x appartenant au cube de volume V (Michel *et al.*, 1999) :

$$\underline{u}(\underline{x}) = \underline{E} \cdot \underline{x} + \underline{u}^*(\underline{x}) \quad (2.1)$$

où $\underline{u}(\underline{x})$ est le vecteur de déplacement correspondant au vecteur de position \underline{x} . \underline{E} est le tenseur de déformation macroscopique appliqué au cube et \underline{u}^* est le déplacement périodique. Dans le cas d'un cube de côté L , le déplacement périodique prend la valeur de zéro partout excepté sur les nœuds cités sur les faces extrêmes du cube où il prend la même valeur que le déplacement du point correspondant opposé. Soit a et b deux nœuds en vis à vis sur deux faces opposées du cube, on aurait alors :

$$\left. \begin{aligned} \underline{u}(\underline{x}^a) &= \underline{E} \cdot \underline{x}^a + \underline{u}(\underline{x}^b) \\ \underline{u}(\underline{x}^b) &= \underline{E} \cdot \underline{x}^b + \underline{u}(\underline{x}^a) \end{aligned} \right\} \rightarrow \underline{u}(\underline{x}^a) - \underline{u}(\underline{x}^b) = \underline{E} \cdot (\underline{x}^a - \underline{x}^b) \quad (2.2)$$

De façon générale ceci peut se simplifier pour tous les nœuds aux frontières du cube de la manière suivante :

$$\begin{aligned} \underline{u}(0, y, z) + \underline{E} \cdot (L, 0, 0) &= \underline{u}(L, y, z) \\ \underline{u}(x, 0, z) + \underline{E} \cdot (0, L, 0) &= \underline{u}(x, L, z) \\ \underline{u}(x, y, 0) + \underline{E} \cdot (0, 0, L) &= \underline{u}(x, y, L) \end{aligned} \quad (2.3)$$

En plus des contraintes, un déplacement nul est imposé au point $(0, 0, 0)$ pour éviter les déplacements de corps rigide et ce qui implique donc les équations suivantes :

$$\begin{aligned} \frac{u_1(L, 0, 0)}{L} &= E_{11} & \frac{u_2(L, 0, 0)}{L} &= E_{12} & \frac{u_3(L, 0, 0)}{L} &= E_{13} \\ \frac{u_1(0, L, 0)}{L} &= E_{21} & \frac{u_2(0, L, 0)}{L} &= E_{22} & \frac{u_3(0, L, 0)}{L} &= E_{23} \\ \frac{u_1(0, 0, L)}{L} &= E_{31} & \frac{u_2(0, 0, L)}{L} &= E_{32} & \frac{u_3(0, 0, L)}{L} &= E_{33} \end{aligned} \quad (2.4)$$

2.1.4 Traitement des résultats

Dans le cadre de cette étude, les valeurs moyennes de déformation et contrainte de chaque grain seront à l'étude. Les déformation et contrainte moyenne sont calculées en moyennant les valeurs de chaque élément constituant le grain pondérées du volume de l'élément et normalisées par le volume total de la cellule :

$$\underline{\underline{\epsilon}}^{cellule} = \frac{1}{V^{total}} \sum V^{element} \cdot \underline{\underline{\epsilon}}^{element} \quad (2.5)$$

$$\underline{\underline{\sigma}}^{cellule} = \frac{1}{V^{total}} \sum V^{element} \cdot \underline{\underline{\sigma}}^{element} \quad (2.6)$$

La contrainte / déformation macroscopique est quant à elle calculée en faisant la moyenne des niveaux de contrainte/déformation de chaque grain (chaque grain étant de taille et de volume identique) :

$$\underline{\underline{E}} = \left\langle \underline{\underline{\epsilon}}^{cellule} \right\rangle_{cellule} = \frac{1}{N} \sum \underline{\underline{\epsilon}}^{cellule} \quad (2.7)$$

$$\underline{\underline{\Sigma}} = \left\langle \underline{\underline{\sigma}}^{cellule} \right\rangle_{cellule} = \frac{1}{N} \sum \underline{\underline{\sigma}}^{cellule} \quad (2.8)$$

2.1.5 Étude de convergence du maillage

En jouant sur les différents paramètres énumérés dans la section 2.1.1 il est alors possible de contrôler le nombre d'éléments par grains. Une étude de convergence est alors nécessaire afin de pouvoir optimiser le temps de calcul et la précision de calcul. Pour cela, pour un même agrégat donné (même nombre de cellules et même distribution d'orientation cristallographique), des simulations ÉF ont été réalisées pour différents maillages plus ou moins raffinés. Les valeurs de chaque grain de chaque maillage sont alors ensuite comparées aux valeurs de chaque grain du maillage le plus raffiné en calculant le biais numérique entre les deux simulations.

Soit une grandeur X (déformation équivalente, contrainte principale, etc.), le biais numérique est l'écart relatif de X entre la solution du maillage de densité d'éléments d et le maillage le plus raffiné de densité d'éléments d_∞ (Éq. 2.9).

$$\Delta X(d) = \frac{X(d) - X(d_\infty)}{X(d_\infty)} \quad (2.9)$$

Deux types d'éléments ayant été utilisés, deux études de convergence du maillage ont alors été réalisées en comparant les résultats au maillage le plus raffiné d'éléments à 4 nœuds d'une part, puis au maillage le plus raffiné d'éléments à 10 nœuds d'autre part (Fig. 2.2).

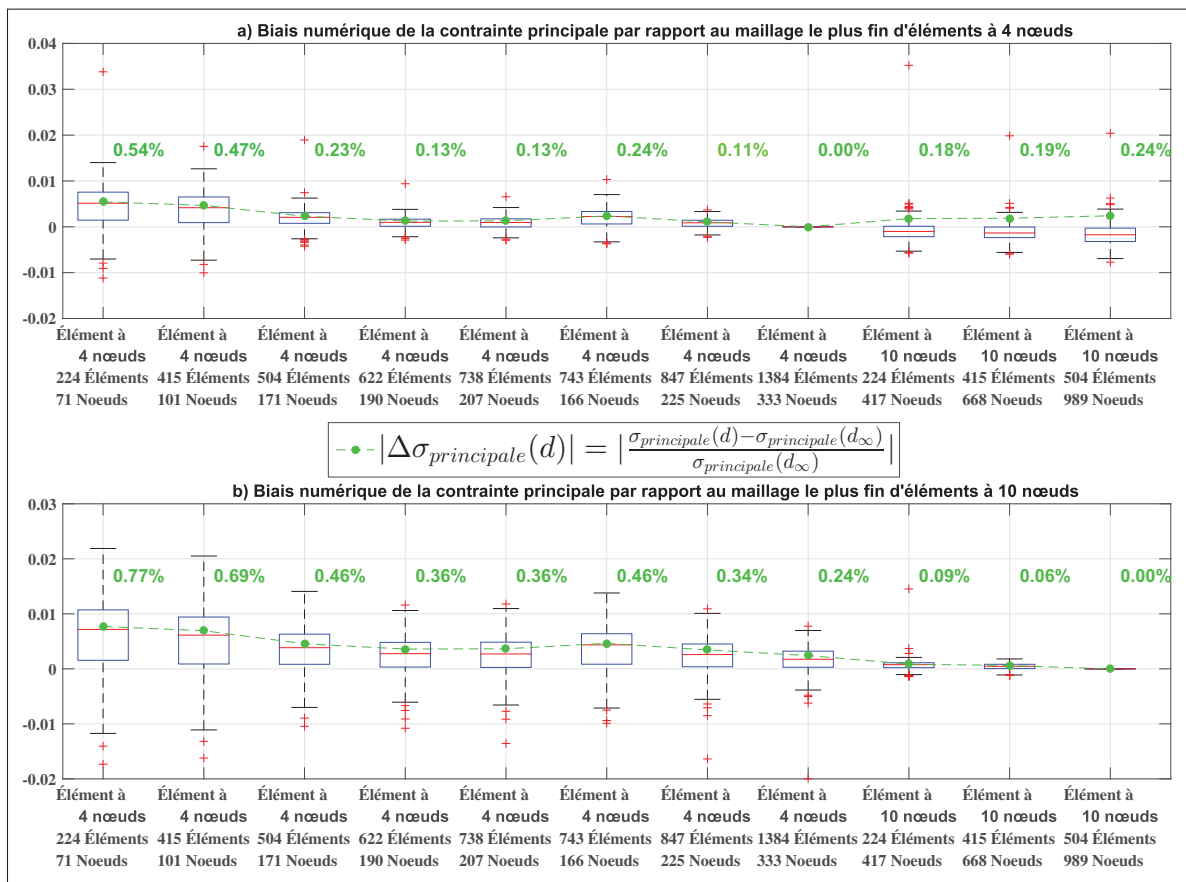


Figure 2.2 Évolution du biais numérique de la contrainte principale pour chaque grain du polycristal en fonction du maillage choisi

Sur la figure 2.2 est représentée en pointillé la moyenne des biais numériques absolus de la contrainte principale de chaque grain. Une boîte à moustaches (Annexe III) est aussi présentée afin d’informer de la distribution des biais numériques dans chaque grain (686 grains).

On peut constater que les maillages grossiers ont une tendance à surestimer la contrainte principale dans les grains en comparaison aux maillages fins.

Le maillage avec des éléments à 10 nœuds, de 224 éléments et 417 nœuds par cellule, est le maillage qui présente le meilleur rapport précision / temps de calcul (le maillage de 224 éléments à 10 nœuds par grain prend 10 à 15 minutes de temps de calcul alors que le maillage à 504 éléments à 10 nœuds par grain prend 10 à 15 heures de temps de calcul), et sera le maillage utilisé dans la suite de l’étude. Ainsi, que ce soit le maillage à 1384 éléments à 4 nœuds par grain ou bien le maillage à 504 éléments à 10 nœuds par grain pris comme référence, une erreur numérique moyenne inférieure à 0,2% est observée (certains points peuvent tout de même atteindre un biais numérique proche de 4%).

2.1.6 Influence des conditions aux limites

Dans l’optique de valider les conditions aux limites périodiques et de prouver qu’il n’y a pas d’effet de bord sur les cellules, l’étude suivante a été mise en place :

Soit V un volume formé de N cellules en structure de Kelvin. Ce volume étant construit de façon périodique, si l’on juxtapose un volume V' parfaitement identique à côté il y aura alors une continuité entre ces deux volumes. En répétant cette opération dans toutes les directions, un espace périodique E est alors formé (Fig. 2.3 a)).

Soit V_A et V_B deux volumes de taille identique au motif initial V , prélevés à différents endroits de l’espace périodique E , auxquels l’on applique le même chargement mécanique. Si les conditions aux limites appliquées à ces deux volumes sont bien périodiques, les résultats dans chaque grain correspondant devraient alors être identiques dans les deux volumes (Fig. 2.3 b)).

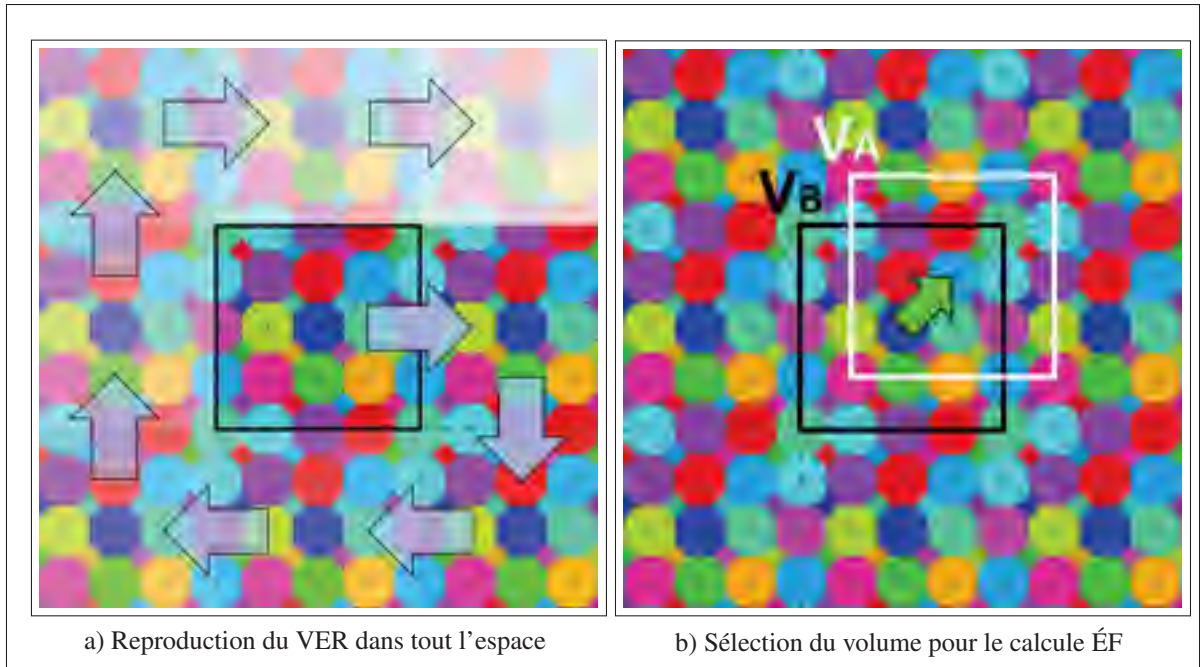


Figure 2.3 Schémas explicatifs de la validation des conditions aux limites périodiques

Lorsque nous comparons les valeurs relatives absolues de la contrainte principale dans chacun des grains des deux volumes V_A et V_B nous constatons que l'écart entre les deux simulations est totalement négligeable ($< 10^{-8}\%$). Par conséquent, les effets de bord peuvent être totalement ignorés, et tous les grains de notre cube polycristallin peuvent être pris en considération dans le cadre de notre étude.

2.1.7 Réalisation et analyse des calculs d'agrégats

Des simulations ÉF ont donc été réalisées sur notre cube polycristallin en structure de Kelvin avec des conditions aux limites périodiques. Pour chacun des 686 grains du VER, les propriétés cristallines élastiques du cristal de fer leur ont été attribuées (Équation 1.3), et une orientation cristallographique a été générée à partir de la méthode des quaternions (cf. section IV). Dix jeux de 686 orientations ont été générés ce qui nous donne un total de 6860 configurations de grain/voisinage différentes à étudier.

Un chargement uniaxial en déformation a été imposé au cube tel que la déformation du cube soit de 0.3% suivant l'axe Z et nulle suivant les autres axes. Cette valeur de 0.3% est purement arbitraire. Le problème étant purement linéaire, les mêmes observations peuvent être faites quelque soit la valeur choisie.

Sur la figure 2.4 est présentée la contrainte moyenne de chaque grain dans la direction de chargement Z en fonction de leur module de Young dans cette même direction. Sur cette figure est aussi présenté en vert la contrainte dans le cas où le chargement serait appliqué au cristal seul ($\underline{\sigma}^C = \mathbb{C}^C : \underline{E}$), et en rouge le maximum et le minimum de la courbe verte.

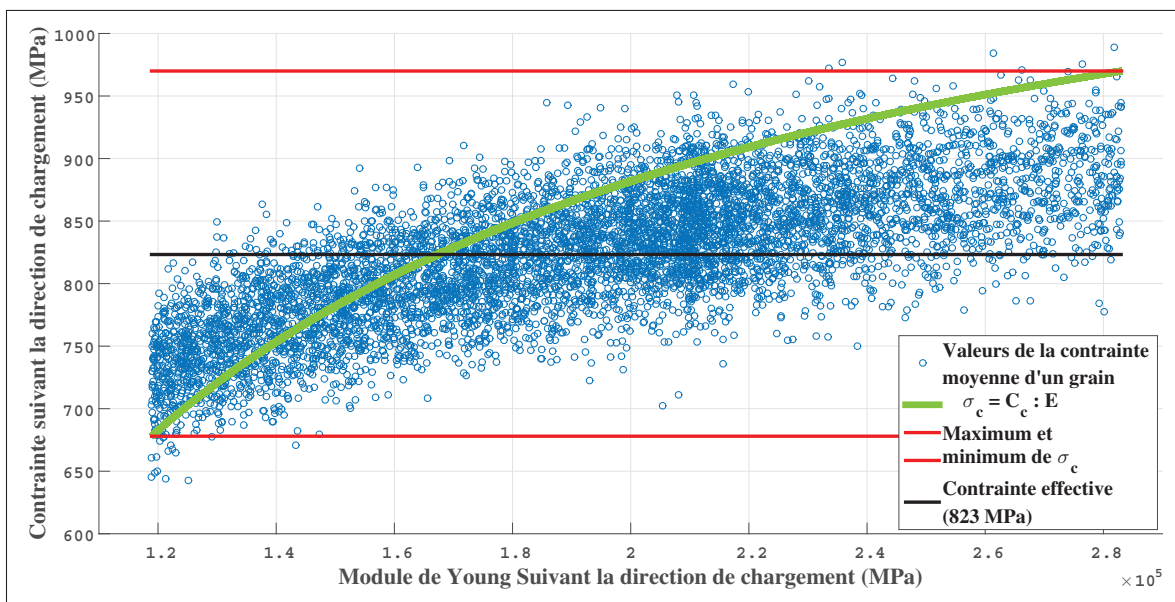


Figure 2.4 Résultats des simulations ÉF des dix jeux d'orientation sur un polycristal de fer de 686 grains en structure de Kelvin (6860 grains différents)

Plusieurs points sont à noter :

- Une amplitude de 350 MPa sur l'ensemble des grains est observée, ce qui représente environ 42% de la contrainte moyenne (823.5 MPa). Il y a donc une forte dispersion des contraintes au sein du polycristal.

- La quasi-totalité des points des résultats ÉF est comprise entre le maximum et le minimum du cas du cristal isolé (en rouge). Ceci peut s'expliquer par le fait que dans le polycristal les grains ayant une prédisposition à fortement se déformer vont être freinés par les grains ayant une faible prédisposition à se déformer, et donc voir leur contrainte réduite. Ceci va avoir pour effet d'augmenter la contrainte dans ces derniers. Il est à noter donc que les points en dehors des limites en rouge sont des points très critiques, qui sont dans une configuration telle que leur entourage les a mis dans une configuration qui exacerbe leur comportement.
- Pour un module de Young donné, une dispersion de la contrainte peut être observée. Ceci est dû à l'influence du voisinage qui est différent d'un grain à l'autre. L'amplitude de la dispersion des contraintes est proche de 150 MPa.
- À partir de ces résultats, les propriétés effectives peuvent être calculées. Les propriétés effectives doivent être isotropes, il y a par conséquent deux constantes à identifier, le module de Young E_{Young} et le coefficient de Poisson ν , tel que :

$$\underline{\underline{\Sigma}} = \begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{11} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{12} & C_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_{11} - C_{12} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{11} - C_{12} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & C_{11} - C_{12} \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0.3\% \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (2.10)$$

$$\rightarrow C_{11} = \Sigma_3 / 0.3\% \quad \text{et} \quad C_{12} = \frac{\Sigma_1 + \Sigma_2}{2 \times 0.3\%}$$

$$E_{Young} = \frac{C_{11}^2 + C_{11} \times C_{12} - 2 \times C_{12}^2}{C_{11} + C_{12}} \quad (2.11)$$

$$\nu = \frac{C_{12}}{C_{11} + C_{12}}$$

Ainsi à partir des équations 2.10 et 2.11, pour le cas du fer, un module de Young de 205,7GPa et un coefficient de Poisson de 0,297 ont été calculés, ce qui représente bien les valeurs typiques de ces matériaux.

L'observation de ces résultats nous montre bien l'importance de l'influence du voisinage d'un grain sur son comportement mécanique, et qu'il est donc nécessaire de prendre le voisinage en considération dans les modèles analytiques.

2.2 Étude de l'influence du voisinage

Afin d'étudier l'influence du voisinage d'un grain sur ce dernier, une étude a été réalisée sur un agglomérat de grains immergés dans une matrice (Fig. 2.5) ayant les propriétés mécaniques effectives du polycristal calculées précédemment.

L'objectif est d'étudier les variations de contrainte dans le grain central de coordonnées (0;0;0) en fonction des hétérogénéités voisines et donc des propriétés de son voisinage. Les orientations cristallographiques et la position par rapport au grain central seront les deux paramètres étudiés (les cotes de notre maillage sont indiquées sur la figure 2.5).

Les conditions aux limites appliquées au cube ne sont plus périodiques, mais sont de type "déformation homogène au contour". Ce type de conditions aux limites sont plus rapides mais ont le défaut d'avoir des effets de bord. Afin d'annuler ces effets de bord au cœur du cube, et donc sur notre agrégat, un rapport de 1/10 entre la taille de l'agrégat (10 unités de longueur) et la taille du cube (100 unités de longueur) a été imposé. Afin de prouver cela un même agrégat a été immergé dans un cube de 200 unité de longueur, c'est à dire un rapport de 1/20, et a montré les mêmes résultats à $10^{-5}\%$ près.

Le chargement est alors appliqué au cube de la manière suivante :

- Le déplacement suivant la direction X est nul pour les nœuds en $X=-50$ et $X=50$;
- Le déplacement suivant la direction Y est nul pour les nœuds en $Y=-50$ et $Y=50$;
- Le déplacement suivant la direction Z est nul pour les nœuds en $Z=-50$;
- Le déplacement suivant la direction Z est de $100 \times 0.3\%$ pour les nœuds en $Z=50$.

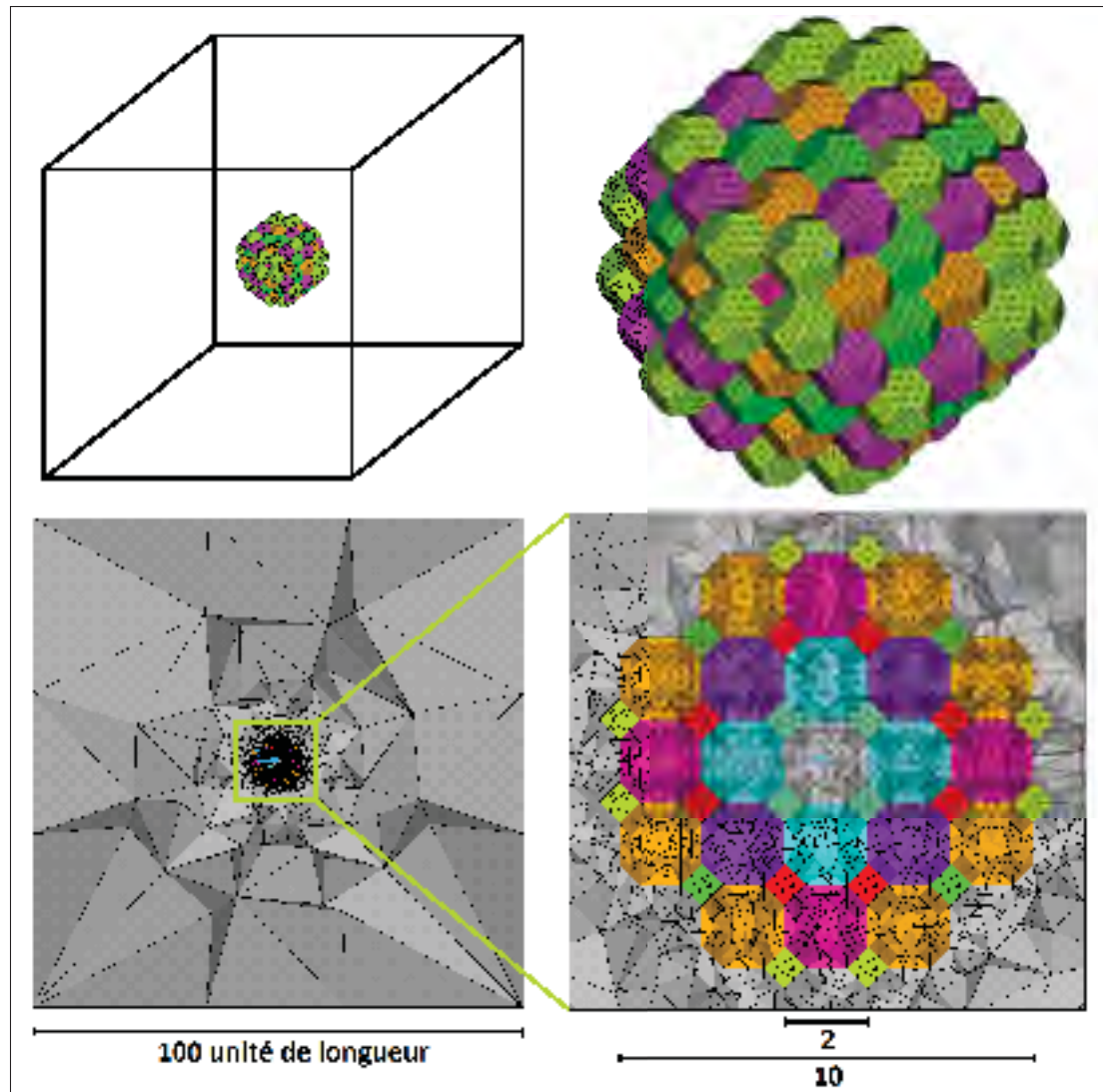


Figure 2.5 Schémas illustrant le maillage de l'étude de l'influence du voisinage

2.2.1 Influence de la distance des grains voisins par rapport au grain central

Pour étudier l'influence de la distance des grains voisins sur la valeur de la contrainte du grain central, les grains situés à équidistance d du grain central ont des propriétés élastiques cristallines avec des orientations générées aléatoirement, et tout le reste, dont le grain central, a les propriétés effectives du matériau et donc un comportement isotrope. Dix couches différentes de grains voisins sont à l'étude (sur la figure 2.5 chaque nuances de couleurs correspond à une

couche différente), et pour chaque couche 50 jeux d'orientations cristallographiques différentes ont été simulés.

Sur la figure 2.6 est présentée la contrainte principale moyenne du grain central en fonction de la distance de la couche étudiée par rapport à celui-ci. Il y a donc pour chaque colonne 50 points différents correspondants aux 50 jeux d'orientations différentes. Dans chacune de ces couches, du fait de la particularité de la structure de Kelvin, le nombre de grains inclus peut y varier. Il y a donc deux paramètres à prendre en compte dans l'analyse des résultats : la distance par rapport au grain central et le nombre de grains sélectionnés.

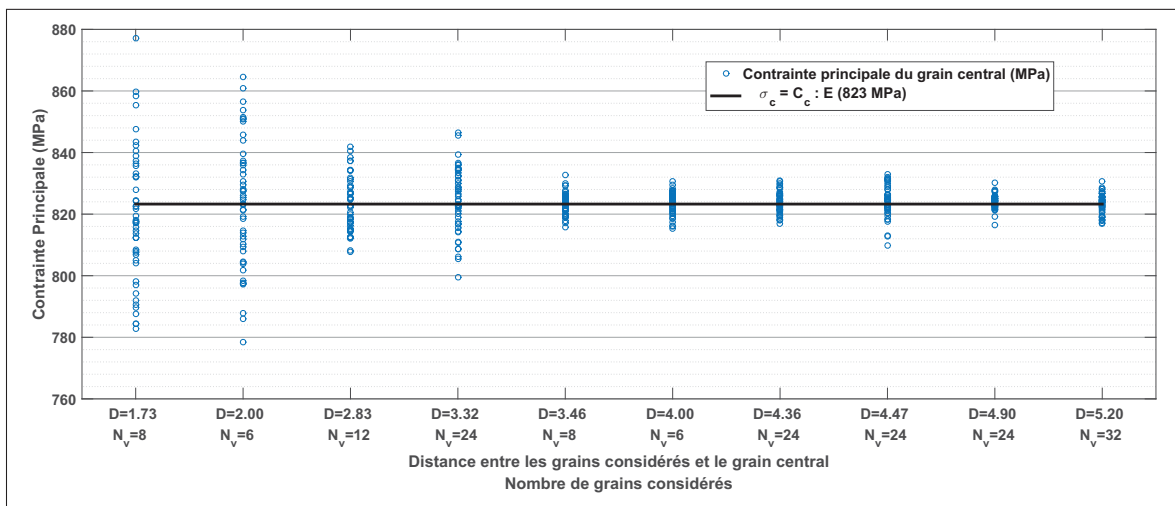


Figure 2.6 Influence des grains voisins en fonction de leur distance par rapport au grain central

Plusieurs points sont à noter :

- D'un point de vue global, nous pouvons constater que plus l'on s'éloigne du grain central plus l'influence des grains voisins s'amointrit.
- Les couches ayant le plus d'influence sur le grain central sont les deux couches les plus proches du grain central, situées en $D = 1,73$ et $D = 2,00$. Malgré le faible nombre de grains compris dans ces couches comparé aux autres couches, une variation de la contrainte allant de 780 à 880 MPa est observée, soit une amplitude de contrainte sur le grain central de 100 MPa.

- Les couches situées en $D = 2,83$ et $D = 3,32$ montrent une influence sur le grain central non négligeable (amplitude de ~ 50 MPa). Ceci peut s'expliquer par la grande quantité de grains dans ces couches ce qui engendre plus d'effets cumulés ; mais individuellement, un grain de la couche située en $D = 3,32$ a beaucoup moins d'influence qu'un grain situé en $D = 2,00$.
- Quelque soit la distance, une amplitude minimale de 16 MPa est tout de même observée. Les grains voisins situées à une distance $D > 4$ (plus loin que la seconde couronne de grain) ont donc une influence non négligeable sur le grain central.

2.2.2 Influence de la position des grains voisins par rapport au grain central

L'influence des grains voisins sur le grain central est étudiée individuellement. C'est-à-dire qu'un seul grain voisin du grain central aura des propriétés élastiques cristallines avec des orientations préalablement sélectionnées (Tab. 2.1) et tout le reste, dont le grain central, a les propriétés effectives isotropes du matériau.

Les orientations cristallographiques ont été choisies afin de couvrir le plus possible le triangle standard des projections stéréographiques dans les différentes directions de l'espace tout en ayant un nombre raisonnable de simulations à réaliser et à traiter.

Les grains choisis pour étudier leur influence sur le grain central ont été sélectionnés en fonction des symétries de la structure (Tab. 2.2). Le chargement étant uniaxial et la structure de Kelvin présentant de nombreuses symétries dans l'espace, la sélection des positions de grain à étudier peut se réduire à 1/16 de du cube.

Sur la figure 2.7 est présentée la contrainte principale du grain central de coordonnées (0;0;0) en fonction de l'orientation du grain voisin pour chacune des orientations et positions sélectionnées.

Tableau 2.1 Liste des orientations sélectionnées pour
l'étude de l'influence des grains voisins individuellement

Module de Young dans la direction de chargement (GPa) / Angles d'Euler														
119 GPa			161 GPa			206 GPa			243 GPa			283 GPa		
φ_1	Φ	φ_2	φ_1	Φ	φ_2	φ_1	Φ	φ_2	φ_1	Φ	φ_2	φ_1	Φ	φ_2
0°	0°	0°	0°	25°	25°	0°	50°	0°	0°	50°	25°	0°	55°	45°
11°	0°	0°	45°	25°	25°	45°	50°	0°	45°	50°	25°	11°	55°	45°
22°	0°	0°	90°	25°	25°	90°	50°	0°	90°	50°	25°	22°	55°	45°
34°	0°	0°	135°	25°	25°	135°	50°	0°	135°	50°	25°	34°	55°	45°
45°	0°	0°	180°	25°	25°	180°	50°	0°	180°	50°	25°	45°	55°	45°
56°	0°	0°	225°	25°	25°	225°	50°	0°	225°	50°	25°	56°	55°	45°
67°	0°	0°	270°	25°	25°	270°	50°	0°	270°	50°	25°	67°	55°	45°
79°	0°	0°	315°	25°	25°	315°	50°	0°	315°	50°	25°	79°	55°	45°

Tableau 2.2 Liste des grains sélectionnés, de leur
position et de leurs symétriques pour l'étude de
l'influence des grains voisins individuellement

Coordonnées du grain (x ; y ; z)	Distance du grain central	Grains symétriques (x ; y ; z)
(1 ; 1 ; 1)	1.73	(-1 ; 1 ; 1), (1 ; -1 ; 1), (-1 ; -1 ; 1), (1 ; 1 ; -1), (-1 ; 1 ; -1), (1 ; -1 ; -1), (-1 ; -1 ; -1)
(2 ; 0 ; 0)	2.00	(0 ; 2 ; 0), (-2 ; 0 ; 0), (0 ; -2 ; 0)
(0 ; 0 ; 2)	2.00	(0 ; 0 ; -2)
(2 ; 2 ; 0)	2.83	(-2 ; 2 ; 0), (2 ; -2 ; 0), (-2 ; -2 ; 0)
(2 ; 0 ; 2)	2.83	(-2 ; 0 ; 2), (0 ; 2 ; 2), (0 ; -2 ; 2), (2 ; 0 ; -2), (-2 ; 0 ; -2), (0 ; 2 ; -2), (0 ; -2 ; -2)
(3 ; 1 ; 1)	3.32	(-3 ; 1 ; 1), (3 ; -1 ; 1), (-3 ; -1 ; 1), (1 ; 3 ; 1), (-1 ; 3 ; 1), (-3 ; 1 ; -1), (3 ; -1 ; -1), (-3 ; -1 ; -1), (1 ; 3 ; -1), (-1 ; 3 ; -1), (3 ; 1 ; -1), (1 ; -3 ; 1), (-1 ; -3 ; 1), (1 ; -3 ; -1), (-1 ; -3 ; -1)
(1 ; 1 ; 3)	3.32	(-1 ; 1 ; 3), (1 ; -1 ; 3), (-1 ; -1 ; 3), (1 ; 1 ; -3), (-1 ; 1 ; -3), (1 ; -1 ; -3), (-1 ; -1 ; -3)
(2 ; 2 ; 2)	3.46	(-2 ; 2 ; 2), (2 ; -2 ; 2), (-2 ; -2 ; 2), (2 ; 2 ; -2), (-2 ; 2 ; -2), (2 ; -2 ; -2), (-2 ; -2 ; -2)
(4 ; 0 ; 0)	4.00	(0 ; 4 ; 0), (-4 ; 0 ; 0), (0 ; -4 ; 0)
(0 ; 0 ; 4)	4.00	(0 ; 0 ; -4)

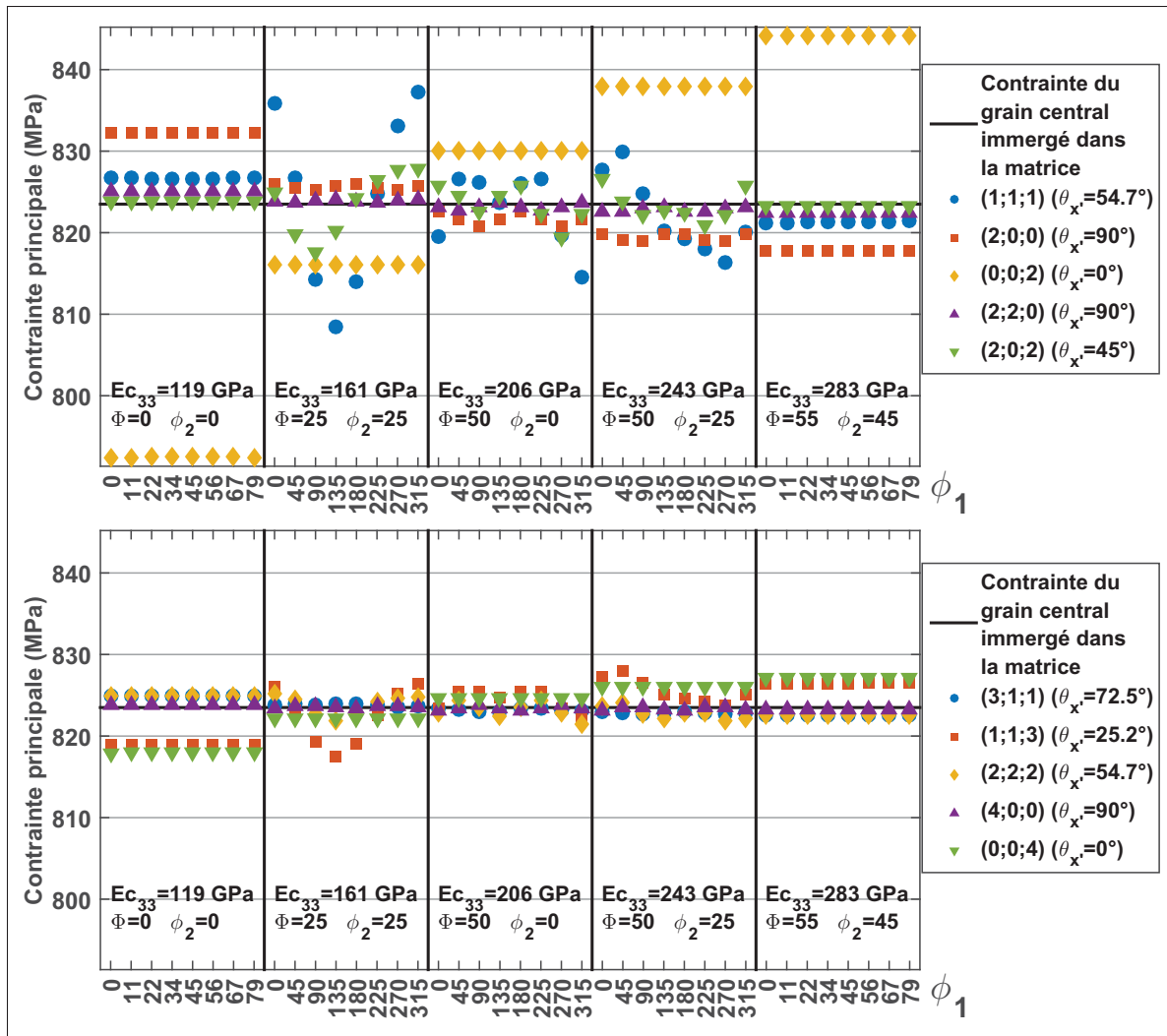


Figure 2.7 Influence des grains voisins en fonction de leur orientation cristallographique et de leur position par rapport au grain central

Plusieurs points sont à noter :

- Comme dans l'étude précédente il est observé d'un point de vue global que plus l'on s'éloigne du grain central plus l'influence du grain choisi diminue.
- La position ayant la plus grande influence sur le grain central est la position (0 ; 0 ; 2), et par conséquent son symétrique (0 ; 0 ; -2), points correspondant aux grains situés juste au-dessus ou en dessous du grain central par rapport à la direction de chargement. Plus le module

de Young augmente, plus la contrainte dans le grain central augmente. L'amplitude de l'influence du grain (0;0;2) sur le grain central va de 793 à 844 MPa, soit une amplitude de 51 MPa ce qui reste tout de même loin de l'amplitude de 350 MPa qui a pu être observée sur les résultats des polycristaux (Fig. 2.4).

- De manière plus générale, on observe pour les grains situés dans l'axe de chargement ((0;0;2),(0;0;4)) et même celui qui s'en rapproche ((1;1;3)) que plus leur module de Young dans la direction de chargement est élevé, plus la contrainte du grain central augmente.
- On remarquera que l'angle d'Euler φ_1 (qui a pour effet de faire varier le module de Young dans toutes les directions perpendiculaires à l'axe de chargement Z) n'a aucune influence sur la réponse du grain central pour les grains situés dans l'axe de chargement.
- À l'inverse, les grains situés dans le plan comprenant le point central et perpendiculaire à l'axe de chargement ((2;0;0), (4;0;0), (2;2;0)) diminuent la contrainte du grain central de manière proportionnelle à leur module de Young. Leur influence sur le grain central est nettement moins importante que les grains situés sur l'axe de chargement (amplitude de contrainte de 51,8 MPa est observée pour la position (0;0;2) contre 14,6 MPa pour la position (2;0;0), et une amplitude de 9,3 MPa pour la position (0;0;4) et contre 0,7 MPa pour la position (4;0;0)). L'angle d'Euler φ_1 , contrairement aux grains situés dans l'axe de chargement, a une influence sur la contrainte, mais cette influence est tout de même faible.
- Tous les autres grains qui ne font pas partie des deux catégories décrites précédemment et qui sont situés à mi-chemin entre l'axe de chargement et le plan perpendiculaire à cet axe contenant le grain central ((1;1;1), (2;0;2), (3,1,1), (1,1,3), (2;2;2)) ont un comportement mixte et sont sensibles aux variations de l'angle φ_1 .
- Nous pouvons remarquer que les grains (1;1;1), (2;0;2), (2;2;2) et (1;1;3) montrent exactement le même comportement et les mêmes variations (un décalage de 45° dans l'angle φ_1 est observé pour le grain (2;0;2) du fait de sa position décalée d'un angle de 45° autour de l'axe Z) avec des amplitudes proportionnelles à leur distance par rapport au grain central.

- Le module de Young dans la direction de chargement pour les grains (1 ; 1 ; 1), (2 ; 0 ; 2), (2 ; 2 ; 2) et (1 ; 1 ; 3) n'est pas le seul élément qui influe la contrainte principale du grain central puisque nous pouvons voir le minimum et le maximum pour un même module de Young.

Tableau 2.3 Synthèse des différents résultats obtenus lors de l'étude de l'influence des grains voisins

Coordonnées du grain voisin	Contrainte principale maximale	Contrainte principale minimale	Amplitude de la contrainte principale	ρ Distance (OC)	φ
(1 ; 1 ; 1)	837,2 MPa	808,5 MPa	28,7 MPa	1,73	54,7°
(2 ; 0 ; 0)	832,3 MPa	817,7 MPa	14,6 MPa	2,00	90°
(0 ; 0 ; 2)	844,2 MPa	792,4 MPa	51,8 MPa	2,00	0°
(2 ; 2 ; 0)	825,0 MPa	822,5 MPa	2,5 MPa	2,83	90°
(2 ; 0 ; 2)	827,8 MPa	817,6 MPa	10,2 MPa	2,83	45°
(3 ; 1 ; 1)	825,0 MPa	822,6 MPa	2,4 MPa	3,32	72,5°
(1 ; 1 ; 3)	828,0 MPa	817,4 MPa	10,6 MPa	3,32	25,2°
(2 ; 2 ; 2)	825,2 MPa	821,5 MPa	3,7 MPa	3,46	54,7°
(4 ; 0 ; 0)	823,8 MPa	823,1 MPa	0,7 MPa	4,00	90°
(0 ; 0 ; 4)	827,2 MPa	817,9 MPa	9,3 MPa	4,00	0°

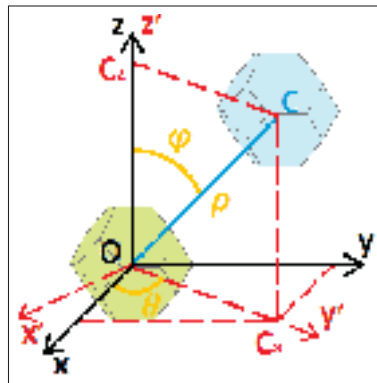


Figure 2.8 Schéma illustrant les coordonnées sphériques du repère formé par le grain central et le grain voisin

Pour résumer, il y a 3 paramètres pour l'influence des grains voisins sur le grain central qui ont été déterminés (Tableau 2.3) :

- La distance entre le grain voisin et le grain central ;
- L'angle φ formé par le grain central, le grain voisin et l'axe de chargement (Figure 2.8) ;
- Le module de Young dans l'axe de chargement du grain voisin.

Malheureusement ces trois paramètres ne sont pas suffisants pour expliquer les variations de la contrainte principale lorsque ces trois paramètres sont fixés. Une corrélation entre les paramètres du tenseur d'élasticité \mathbb{C} du grain voisin, sa position et la contrainte du grain central est présentée dans la section 2.2.5.

2.2.3 Influence de la position des grains voisins par rapport au grain central en fonction de l'orientation du grain central

Dans cette partie afin de voir l'influence de l'orientation cristallographique du grain central sur les remarques qui ont été faites dans la partie précédente, deux orientations ont été sélectionnées pour le grain central : $[0;0;0]$ et $[0;55;45]$. Ces deux orientations correspondent respectivement aux orientations ayant le module de Young dans la direction de chargement minimal et maximal.

La figure 2.9 représente l'écart de valeur entre :

- la contrainte principale du grain central immergé dans la matrice homogène plus un grain voisin avec une orientation prédéfinie (les orientations sélectionnées sont les mêmes que dans la partie précédente (Tab. 2.1)) ;
- et la contrainte principale du grain central immergé dans la matrice homogène sans aucune hétérogénéité.

Seuls les grains de position $(1;1;1)$, $(2;0;0)$ et $(0;0;2)$ sont représentés, mais les mêmes tendances sont observées pour les autres positions : nous constatons que, quel que soit l'orientation du grain central, l'influence du grain voisin sur le grain central reste la même.

Il y a tout de même une exception : pour la position (0;0;2) on observe un écart de 10 MPa entre les deux orientations extrêmes. Ceci est aussi observé pour les autres positions, mais à des niveaux beaucoup plus négligeables : l'orientation [0;55;45] a plus tendance à s'éloigner du comportement en milieu homogène que l'orientation [0;0;0].

L'hypothèse suivante peut être tirée de ces résultats : plus le niveau de contrainte du grain central en milieu homogène est élevé plus l'influence du grain voisin est importante.

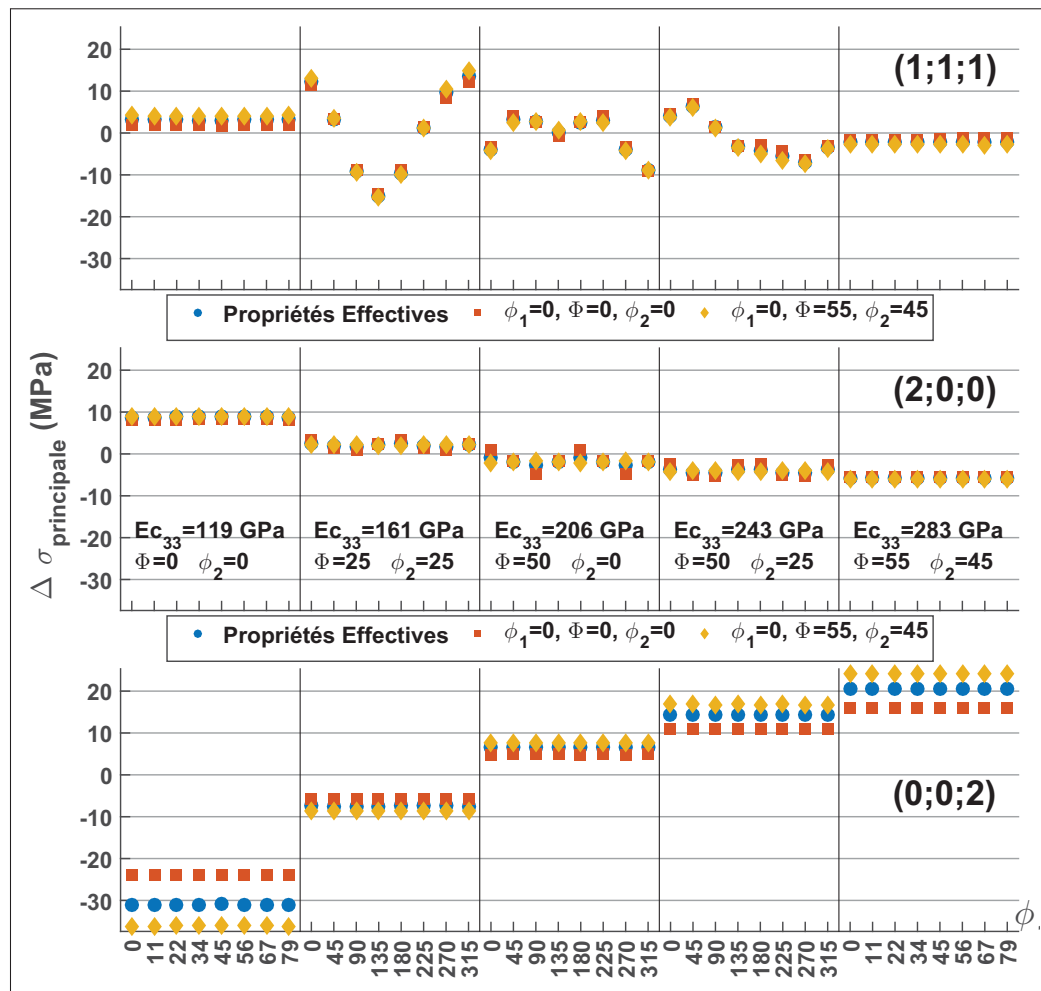


Figure 2.9 Comparaison de l'influence des grains voisins ((1;1;1), (2;0;0), (0;0;2)) pour les différentes orientations du grain central ($\Delta \sigma_{\text{principale}}$: différence entre la contrainte principale du grain central immergé dans la matrice et avec un grain voisin d'orientation cristallographique prédéfinie et la contrainte principale du grain central immergé seul dans la matrice sans grain voisin)

2.2.4 Influence cumulée de grains voisins

À partir des résultats de la section 2.2.2, parmi les 40 orientations sélectionnées, ont été identifiées pour chacune des positions de grain voisin les orientations qui ont pour effet de réduire la contrainte du grain central au plus bas (MIN) et celles qui ont pour effet de l'augmenter au plus haut (MAX) pour chacune des positions de grain voisin.

Il reste maintenant à étudier l'influence sur le grain central du cumul de plusieurs grains voisins.

Pour cela les propriétés mécaniques de notre cube sont réparties de la manière suivante (Fig. 2.10) :

- Le grain central a pour propriétés mécaniques soit les propriétés élastiques effectives, soit les propriétés élastiques cristallines d'orientation $[0;0;0]$ ou $[0;55;45]$ (orientation ayant respectivement le module de Young minimal et maximal dans la direction de chargement).
- Un ou plusieurs grains voisins ont été sélectionnés. Il a été attribuées à ces grains une des deux orientations critiques associées à la position du grain voisin (MAX ou MIN).
- Comme pour toutes les études précédentes, tout le reste du cube (matrice et grains non concernés) ont pour propriétés mécaniques les propriétés élastiques effectives.

Les différentes configurations qui ont donc été réalisées sont présentées sur les figures 2.10, et les résultats sont affichés sur la figure 2.11. Les valeurs numériques sont présentées dans le tableau 2.4. Dans ce tableau, le numéro de simulation 0A correspond au cas où le grain central est immergé dans la matrice sans aucune hétérogénéité, et le numéro 0B correspond au cas où le grain central est seul, sans matrice ni hétérogénéité autour de lui ($\underline{\sigma}_{grain} = \mathbb{C} : \underline{E}$).

ATTENTION : il ne faut pas oublier que les grains ayant la même couleur sur la figure 2.10 n'ont pas nécessairement la même orientation cristallographique. Pour chaque position le choix de l'orientation est attribuée en fonction de celle qui a eu le plus d'influence sur le grain central (résultats de la figure 2.7)(φ_1 a été adapté pour les positions symétriques). En rouge sont représentées les orientations qui ont le plus augmenté la contrainte du grain central, et en bleu les orientations qui l'ont le plus diminué.

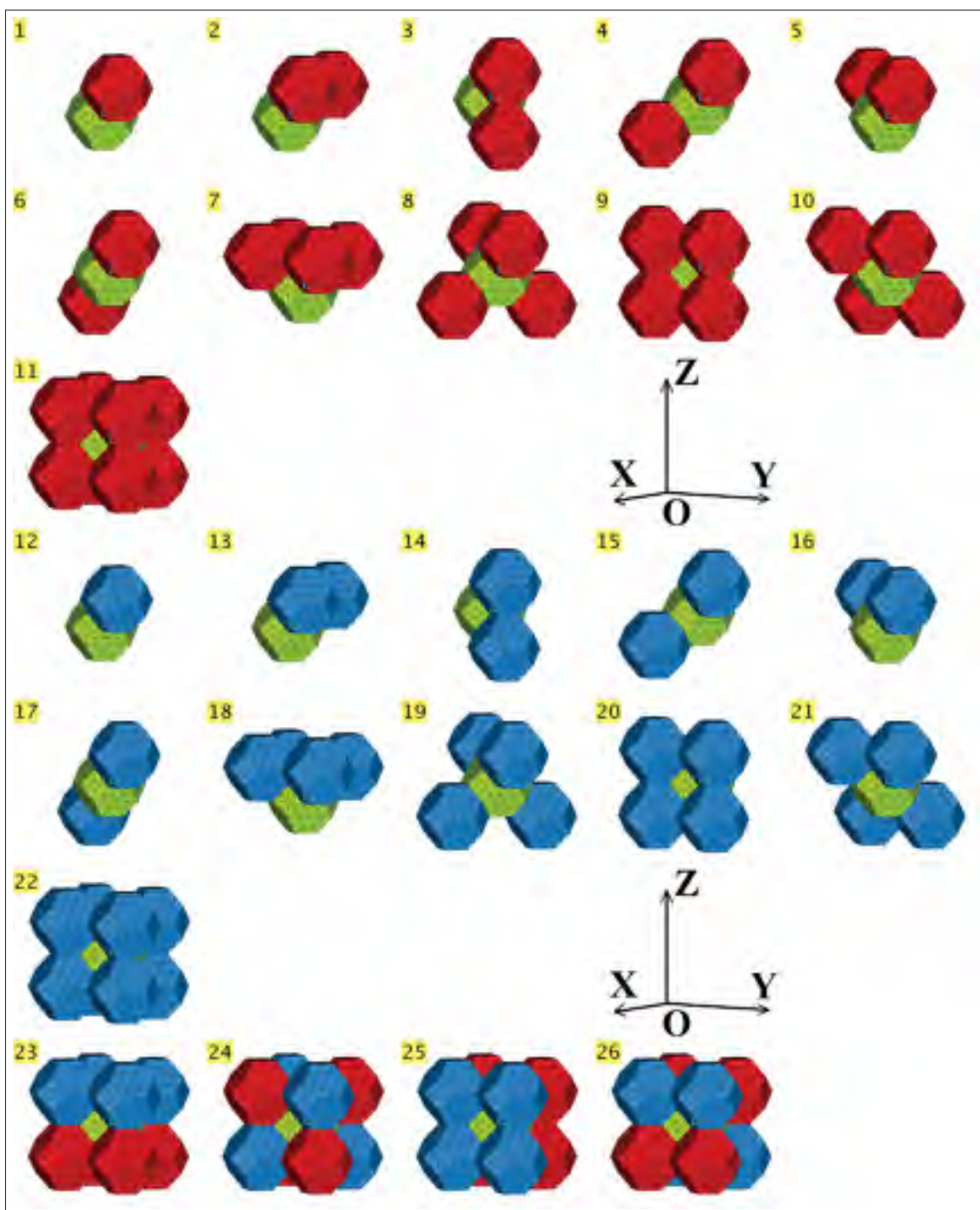


Figure 2.10 Illustration des différentes simulations effectuées. En vert est représenté le grain central, en rouge les grains voisins ayant l'orientation la plus contraignante pour le grain central et en bleu l'orientation la moins contraignante. La matrice et tous les autres grains ont pour propriétés élastiques les propriétés effectives du matériau calculées précédemment (Éq. 2.10)

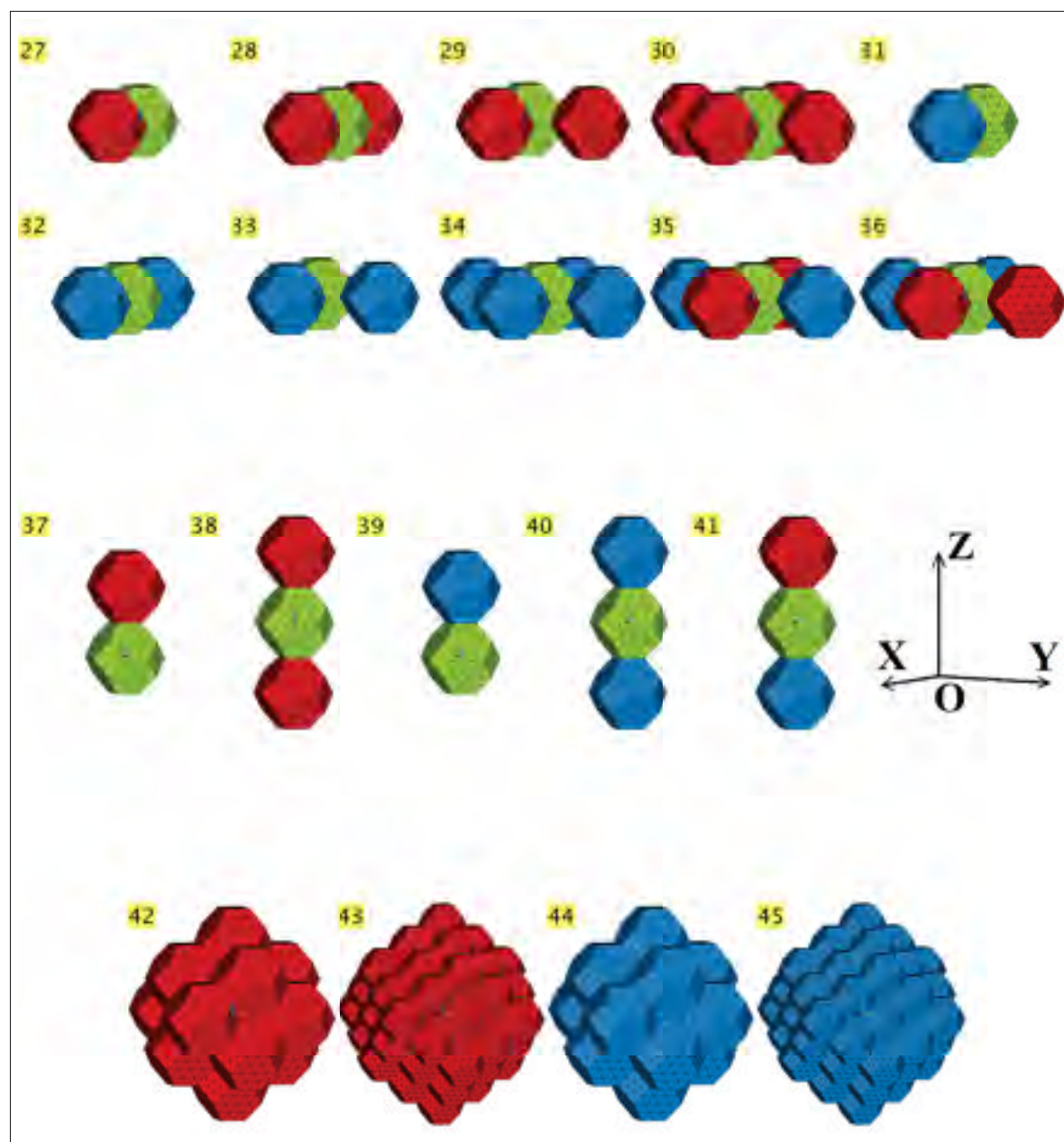


Figure 2.10 Illustration des différentes simulations effectuées. ... (suite)

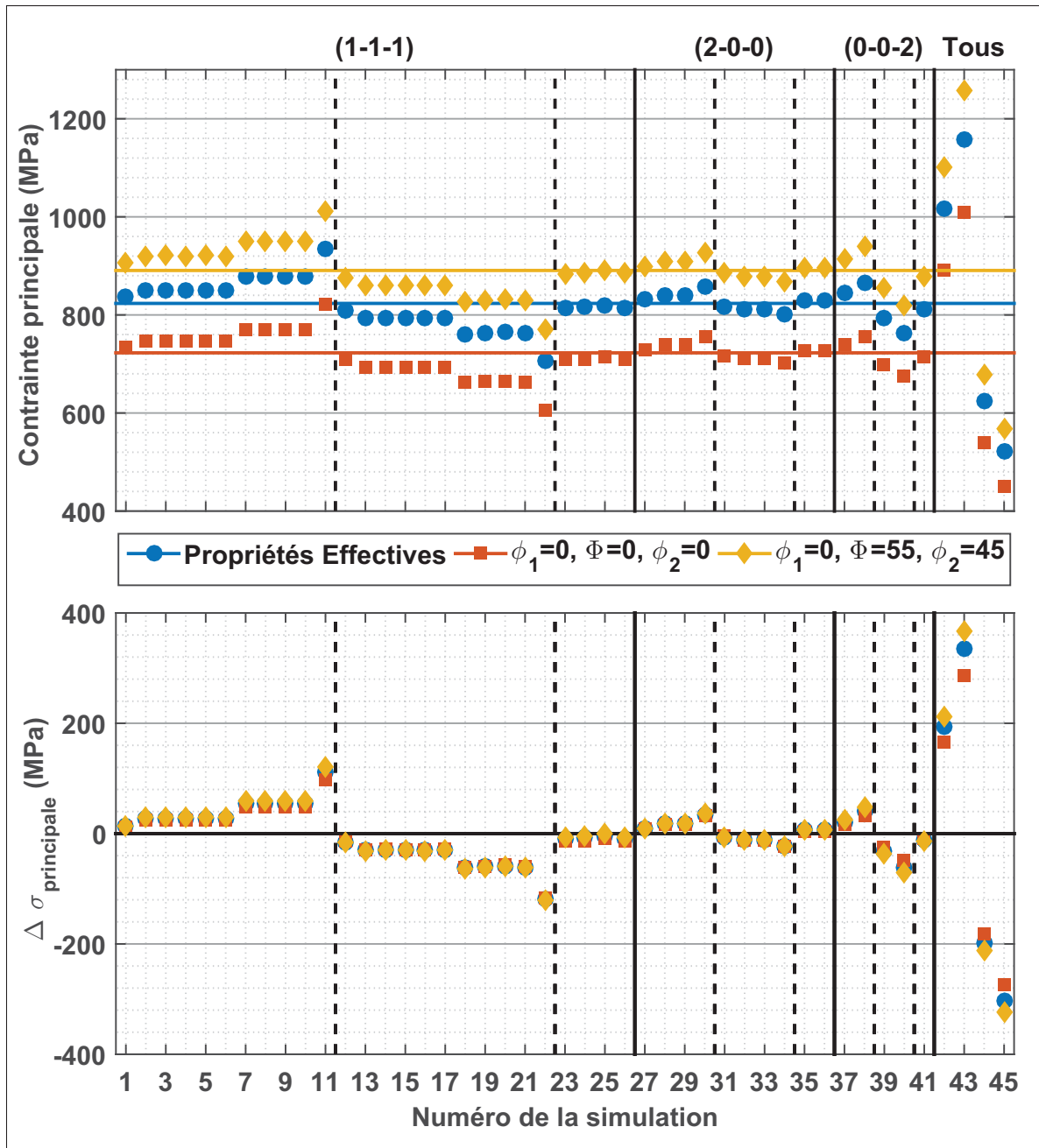


Figure 2.11 Comparaison de l'influence des grains voisins ((1 ; 1 ; 1), (2 ; 0 ; 0), (0 ; 0 ; 2)) pour les différentes orientations du grain central ($\Delta\sigma_{principale}$: différence entre la contrainte principale du grain central immergé dans la matrice et avec ses grains voisins d'orientation cristallographique prédéfinie et la contrainte principale du grain central immergé seul dans la matrice sans grain voisin)

Tableau 2.4 Valeurs numériques de la figure 2.11 (les numéros de simulation correspondent aux numéros indiqués sur les figures 2.10)

(1;1;1)						(2;0;0)					
N°	Nb. grain voisin		$\sigma_{principale}$ (MPa)			N°	Nb. grain voisin		$\sigma_{principale}$ (MPa)		
	MAX	MIN	Bleu	Rouge	Jaune		MAX	MIN	Bleu	Rouge	Jaune
0A	0	0	823,5	722,7	890,7	27	1	0	832,3	730,7	899,7
0B	0	0	823,5	678,0	970,0	28	2	0	841,0	738,7	908,6
1	1	0	837,2	734,8	905,4	29	2	0	841,0	738,7	908,6
2	2	0	850,9	746,9	920,3	30	4	0	858,4	754,6	926,5
3	2	0	851,2	747,4	920,7	31	0	1	817,7	717,1	884,7
4	2	0	850,8	746,7	920,1	32	0	2	811,9	711,7	878,9
5	2	0	851,1	747,4	920,5	33	0	2	811,9	711,7	878,9
6	2	0	851,0	747,3	920,2	34	0	4	800,2	700,7	866,9
7	4	0	878,8	771,5	950,7	35	2	2	829,5	727,9	896,9
8	4	0	878,3	771,0	950,1	36	2	2	829,5	727,8	896,8
9	4	0	878,7	771,2	950,7						
10	4	0	878,3	771,0	950,1	(0;0;2)					
N°	Nb. grain voisin		$\sigma_{principale}$ (MPa)			N°	Nb. grain voisin		$\sigma_{principale}$ (MPa)		
	MAX	MIN	Bleu	Rouge	Jaune		MAX	MIN	Bleu	Rouge	Jaune
11	8	0	935	820,6	1011,8	37	1	0	844,2	738,5	914,8
12	0	1	808,5	708,2	875,4	38	2	0	865,2	754,6	939,4
13	0	2	793,1	693,3	859,7	39	0	1	792,4	698,7	854,5
14	0	2	794,5	694,5	861,0	40	0	2	762,1	675,2	819,4
15	0	2	793,7	693,8	860,3	41	1	1	812,5	714,2	877,8
16	0	2	793,4	693,5	859,9						
17	0	2	793,8	694,3	860,3						
18	0	4	761,4	662,0	827,3						
19	0	4	763,7	664,3	829,6	TOUS					
N°	Nb. grain voisin		$\sigma_{principale}$ (MPa)			N°	Nb. grain voisin		$\sigma_{principale}$ (MPa)		
	MAX	MIN	Bleu	Rouge	Jaune		MAX	MIN	Bleu	Rouge	Jaune
20	0	4	764,8	665,3	830,8	42	14	0	1017,4	889,7	1102,5
21	0	4	763,0	663,6	828,8	43	64	0	1157,8	1009	1257,2
22	0	8	705,4	607,1	770,2	44	0	14	624,1	540,5	678,9
23	4	4	813,3	707,9	883,4	45	0	64	521,1	449,8	567,8
24	4	4	815,8	710,1	886,1						
25	4	4	819,7	713,5	890,5						
26	4	4	814,5	709,1	884,7						

Plusieurs points sont à noter :

- Le grain de position (1 ;1 ;1) et ses symétriques (au nombre de 8) introduisent ensemble une augmentation de la contrainte dans le grain central pouvant aller de +121 MPa (N°11) à -120 MPa (N°22) ;

- Le grain de position (2 ;0 ;0) et ses symétriques (au nombre de 4) introduisent une distorsion dans le grain central pouvant aller de +37 MPa (N°30) à -24 MPa (N°34) ;
- Le grain de position (0 ;0 ;2) et ses symétriques (au nombre de 2) introduisent une distorsion dans le grain central pouvant aller de +49 MPa (N°38) à -71 MPa (N°40) ;
- Les 14 voisins les plus proches, c'est-à-dire les 8 grains (1 ;1 ;1), les 4 (2 ;0 ;0) et les 2 (0 ;0 ;2), introduisent une distorsion dans le grain central pouvant aller de +212 MPa (N°42) à -212 MPa (N°44) ;
- Les 64 voisins les plus proches, c'est-à-dire tous les grains cités dans le tableau 2.2, introduisent une distorsion dans le grain central pouvant aller de +367 MPa (N°43) à -323 MPa (N°45). Ces augmentations de la contrainte sont très importantes et sont donc des configurations critiques pour le grain central qui serait alors très susceptible de plastifier de manière plus importante que les autres grains et donc de fissurer en premier. C'est typiquement le genre de configuration que l'on veut éviter pour empêcher la fatigue du matériau.

Pour une orientation du grain central de [0;55;45] (points en jaune sur la courbe), les contraintes obtenues dans les simulations 11, 42 et 43 sont supérieures à celle de la simulation 0B (il est bon de rappeler que la simulation 0B correspond au cas où le grain central est seul sans matrice ni hétérogénéité autour de lui). L'orientation [0;55;45] étant l'orientation qui subit la plus forte contrainte individuellement (module de Young dans la direction de chargement le plus élevé) elle devrait alors voir sa contrainte tirée vers le bas par son environnement (la matrice et voisinage) : mais ce n'est pas ce que l'on constate ici. La configuration des simulations 11, 42 et 43 ont formé un environnement tellement critique pour le grain central que sa contrainte devient même supérieur à ce qu'elle devrait être si le chargement était appliqué directement au grain seul (simulation 0B).

À l'inverse, pour une orientation du grain central de $[0;0;0]$ (module de Young dans la direction de chargement le plus faible) la contrainte dans le grain central pour les simulations 22, 44 et 45 est inférieure à celle dans la simulation 0B.

Les groupes de simulation présentant les mêmes distributions d'orientation, mais réparties de manière différente (exemple : les simulations 2 à 6, ou bien les simulations 7 à 10, etc...) présentent dans leur ensemble les mêmes résultats (pour le groupe (23 à 26) on peut observer une différence pouvant aller jusqu'à 7 MPa ce qui reste tout de même très faible pour une différence entre deux cas extrêmes). On peut donc alors supposer que l'agencement des orientations n'a peu d'influence sur le grain central.

L'effet de cumul est particulièrement intéressant : prenons les résultats des simulations 1 (1 voisin), $\langle 2, 3, 4, 5, 6 \rangle$ (2 voisins), $\langle 7, 8, 9, 10 \rangle$ (4 voisins) et 11 (8 voisins), et normalisons les par la contrainte obtenue dans la simulation 0A. Un facteur de distorsion des $837.2/823.5 = 1.0166$ est obtenue avec un seul voisin, $851.0/823.5 = 1.0334$ avec 2 voisins, $878.5/823.5 = 1.0668$ avec quatre voisins, et $935.0/823.5 = 1.1354$ avec huit voisins. Or ces facteurs peuvent être reliés entre eux de la manière suivante : $1.1354 \approx 1.0668^2 \approx 1.0334^4 \approx 1.0166^8$. On peut donc observer que de manière générale nous avons :

$$\sigma_{C \text{ principale}} = \sigma_{C \text{ principale}}^{0A} \times \prod_n^N \alpha^n(x, y, z, \varphi_1, \Phi, \varphi_2) \quad (2.12)$$

où $\sigma_{C \text{ principale}}^{0A}$ est la contrainte principale obtenue par la simulation 0A du grain central, n est l'indice d'un grain voisin donné, N le nombre de grains voisins, et $\alpha^n(x, y, z, \varphi_1, \Phi, \varphi_2)$ le facteur de distorsion engendré sur le grain central par un seul grain voisin localisé en $(x; y; z)$ d'orientation $[\varphi_1; \Phi; \varphi_2]$.

Ceci peut également s'appliquer aux simulations 42, 43, 44 et 45. Soit :

- $\alpha_{MAX}^{(1;1;1)} = \sigma_{C \text{ principale}}^1 / \sigma_{C \text{ principale}}^{0A} = 837,2/823,5 = 1,0166$;
- $\alpha_{MAX}^{(2;0;0)} = \sigma_{C \text{ principale}}^{27} / \sigma_{C \text{ principale}}^{0A} = 832,3/823,5 = 1,0107$;
- $\alpha_{MAX}^{(0;0;2)} = \sigma_{C \text{ principale}}^{37} / \sigma_{C \text{ principale}}^{0A} = 844,2/823,5 = 1,0251$;

- $\alpha_{MAX}^{7 autres} \approx 826.0/823,5 \approx 1,003$ (moyenne des contraintes maximales du tableau 2.3 pondérées par le nombre de symétrique de chaque position).

En utilisant l'équation 2.12, on aurait alors pour la simulation 42 avec le grain central ayant les propriétés effectives $\sigma_{C principale}^{42} = \sigma_{C principale}^{0A} \times \alpha_{MAX}^{(1;1;1) 8} \times \alpha_{MAX}^{(2;0;0) 4} \times \alpha_{MAX}^{(0;0;2) 2} = 1030$ MPa ce qui est très proche du résultat obtenu pour la simulation 42 qui est de 1017 MPa. De même pour la simulation 43 avec le grain central ayant les propriétés effectives on aurait $\sigma_{C principale}^{43} = \sigma_{C principale}^{0A} \times \alpha_{MAX}^{(1;1;1) 8} \times \alpha_{MAX}^{(2;0;0) 4} \times \alpha_{MAX}^{(0;0;2) 2} \times \alpha_{MAX}^{7 autres 50} = 1199$ MPa ce qui est aussi assez proche du résultat obtenu pour la simulation 43 qui est de 1158 MPa malgré l'approximation de $\alpha_{MAX}^{7 autres}$ qui a été fait.

Ainsi il est possible de prévoir les résultats obtenus et avec cette approche il serait possible de prédire les résultats de toutes les combinaisons de voisinage.

Cette approche explique aussi pourquoi l'orientation du grain central $[0;55;45]$ a plus tendance à s'éloigner du comportement prédit par un milieu homogène que pour l'orientation $[0;0;0]$. En effet, lorsque l'on calcule la distorsion $\left| \sigma_{C principale}^{0A} \times \left(1 - \prod_n^N \alpha^n \right) \right|$, elle est plus élevée pour l'orientation $[0;55;45]$ que pour l'orientation $[0;0;0]$ puisque la contrainte $\sigma_{C principale}^{0A}$ de l'orientation $[0;55;45]$ qui est supérieure à celle de l'orientation $[0;0;0]$, et les facteurs α sont indépendants du grain central. Ceci exacerbe donc la valeur de la contrainte local du grain central d'orientation $[0;55;45]$.

2.2.5 Modélisation des facteurs α

À partir des hypothèses faites avec la constitution de l'équation 2.12, une approche phénoménologique a été mise en place afin de pouvoir trouver les facteurs α en fonction de la position du grain voisin et de son orientation.

Les résultats représentés sur la figure 2.7 ont été étudiés et comparés aux composantes du tenseur de rigidité du grain voisin. Sur la figure 2.12 sont corrélées à la contrainte principale du grain central les composantes du tenseur de rigidité C_{3333} , C_{1133} et $\sqrt{2}C_{3313}$ exprimé dans le repère de référence tourné de l'angle θ tel que l'axe x pointe vers C_x (Fig. 2.8). Ce repère sera appelé le repère ϑ par la suite.

Une première corrélation entre les grains voisins de position de type $(0;0;Z)$ et la composante C_{3333} a été faite. On observe que la contrainte principale moyenne du grain central peut s'exprimer de la manière suivante : $\sigma_{C \text{ principale}} = A \times C_{3333} + B = \sigma_{C \text{ principale}}^{0A} \times (a \times C_{3333} + b)$. Le même genre de corrélation a ensuite été fait entre les grains voisins de position de type $(X;Y;0)$ et les composantes C_{3333} et C_{1133} . Finalement, il a été observé de manière générale que pour une orientation donnée on a :

$$\alpha(X,Y,Z) = a_1 \times C_{3333} + a_2 \times C_{1133} + a_3 \times \sqrt{2}C_{3313} + a_4 \quad (2.13)$$

où les a_i dépendent de (X,Y,Z) , et a_2 et a_3 sont nulles si X et Y le sont, et a_3 est nulle si Z l'est.

L'identification des coefficients a_i se fait alors facilement : il suffit de résoudre le système d'équations linéaires suivant :

$$\begin{bmatrix} a_1(X,Y,Z) \\ a_2(X,Y,Z) \\ a_3(X,Y,Z) \\ a_4(X,Y,Z) \end{bmatrix} = \left(\sigma_p^{0A} \begin{bmatrix} C_{3333}^{\vartheta 1} & C_{1133}^{\vartheta 1} & \sqrt{2}C_{3313}^{\vartheta 1} & 1 \\ C_{3333}^{\vartheta 2} & C_{1133}^{\vartheta 2} & \sqrt{2}C_{3313}^{\vartheta 2} & 1 \\ C_{3333}^{\vartheta 3} & C_{1133}^{\vartheta 3} & \sqrt{2}C_{3313}^{\vartheta 3} & 1 \\ C_{3333}^{\vartheta 4} & C_{1133}^{\vartheta 4} & \sqrt{2}C_{3313}^{\vartheta 4} & 1 \end{bmatrix} \right)^{-1} \times \begin{bmatrix} \sigma_p(\varphi_1^1, \phi^1, \varphi_2^1) \\ \sigma_p(\varphi_1^2, \phi^2, \varphi_2^2) \\ \sigma_p(\varphi_1^3, \phi^3, \varphi_2^3) \\ \sigma_p(\varphi_1^4, \phi^4, \varphi_2^4) \end{bmatrix} \quad (2.14)$$

Après une optimisation à partir des résultats présentés sur la figure 2.7, les quatre coefficients a_i ont été identifiés. Ils sont représentés dans le tableau 2.5 pour les 10 positions étudiées dans ce rapport. Dans le tableau 2.6 sont représentées l'amplitude de l'écart entre la contrainte

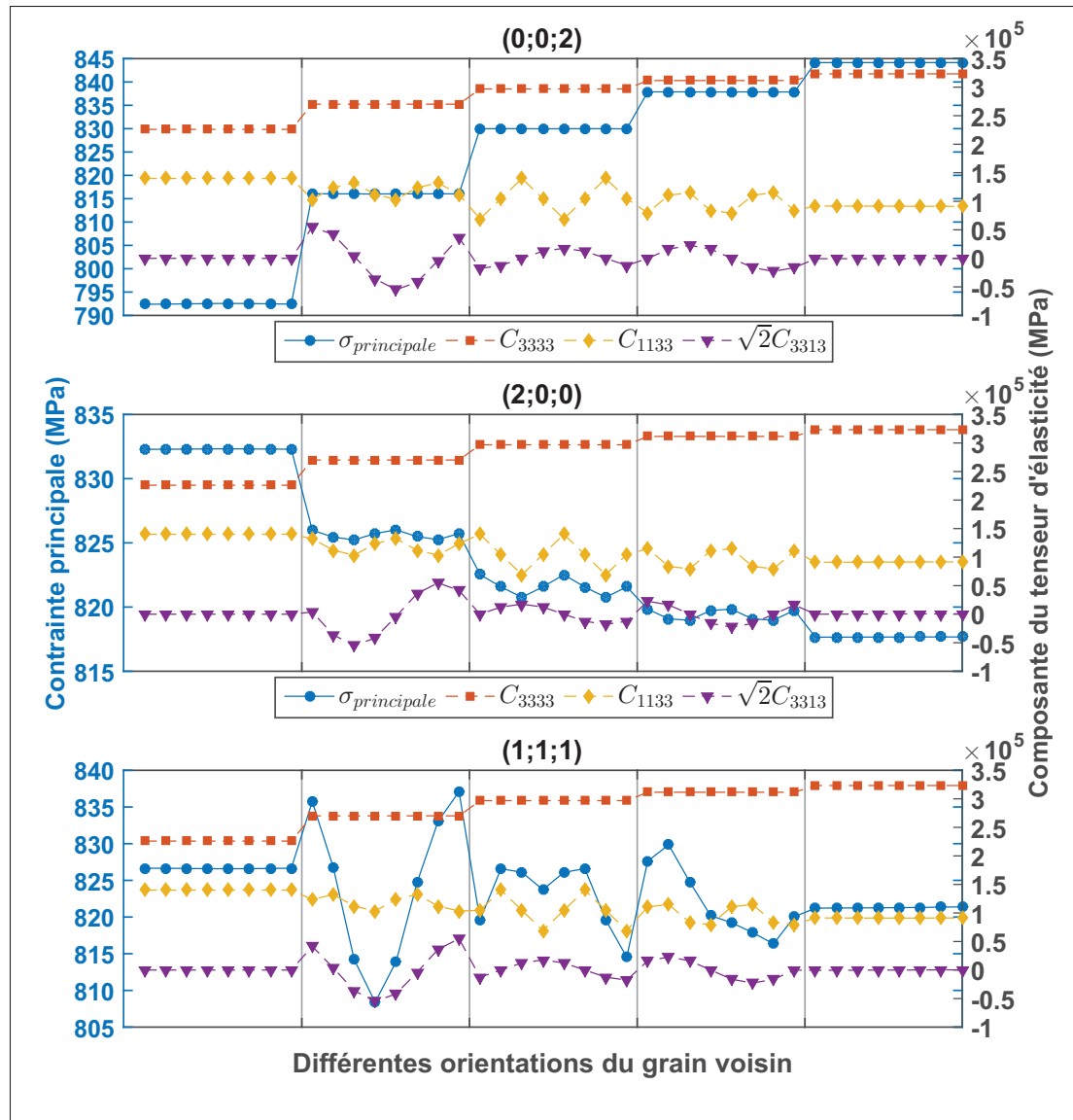


Figure 2.12 Comparaison de la contrainte principale du grain central (axe des ordonnées de gauche) et des composantes C_{3333} , C_{1133} et $\sqrt{2}C_{3313}$ du tenseur de rigidité du grain voisin exprimé dans le repère ϑ associé (Fig. 2.8)(axe des ordonnées de droite) pour différentes positions du grain voisin ((1 ;1 ;1), (2 ;0 ;0), (0 ;0 ;2))

principale calculée par ÉF et la contrainte principale calculés à partir des coefficients a_i pour les différentes positions de grain voisin, et différentes orientations du grain central.

On observe que le coefficient a_1 dépend de l'angle θ et de la distance d entre le grain central et le grain voisin. Pour un angle θ fixé, la valeur de a_1 diminue lorsque d augmente. Un changement de signe de a_1 est observé suivant si $|\theta|$ est inférieur ou supérieur à $\sim 45^\circ$. Les valeurs des autres coefficients sont quant à elles peut-être liées à une identification mathématique trop rigide, sans considération des phénomènes physiques.

La précision du modèle est très bonne lorsque le grain central a les propriétés effectives (isotropes), mais l'est un peu moins lorsque le grain central a ses propriétés cristallines avec ses orientations extrêmes. L'hypothèse que les coefficients α soient indépendants du grain central ne serait pas totalement valide, mais acceptable car l'écart maximal que l'on observe est de 3,37 MPa pour une contrainte de ~ 723 MPa à la position $(0;0;2)$, ce qui reste tout de même une faible valeur ($\sim 8.5\%$ de l'amplitude d'influence de la position $(0;0;2)$ pour un grain central d'orientation $[0;0;0]$ (différence entre les simulations N°37 et 39)).

Les paramètres a_i identifiés pour les différentes positions d'hétérogénéité sont aussi valides pour leurs positions symétriques (Tableau 2.2) en prenant en compte les tenseurs de rigidité exprimés dans un repère lié à la position de l'hétérogénéité. Il y a tout de même une différence à noter entre les points symétriques par rapport au plan XY : pour une même orientation donnée, le tenseur de rigidité exprimé dans le repère ϑ d'une hétérogénéité de coordonnées $(x;y;z)$ va avoir la même expression que pour une hétérogénéité de coordonnées $(x;y;-z)$. Or leur influence sur le grain central n'est pas la même. Par contre, pour une même orientation donnée, une hétérogénéité de coordonnées $(x;y;z)$ va avoir la même influence sur le grain central qu'une hétérogénéité de coordonnées $(-x;-y;-z)$. Par conséquent, tous les tenseurs de rigidité des positions de type $(x;y;-|z|)$ peuvent être exprimés dans le même repère que le tenseur de rigidité de la position $(-x;-y;|z|)$.

Tableau 2.5 Coefficients a_i obtenus après optimisation sur les résultats de la figure 2.7

Position de l'hétérogénéité	a1 (MPa^{-1})	a2 (MPa^{-1})	a3 (MPa^{-1})	a4
(1 ; 1 ; 1)	-2,02E-9	1,31E-7	3,16E-7	0,99
(2 ; 0 ; 0)	-1,72E-7	2,80E-8	0	1,05
(0 ; 0 ; 2)	6,45E-7	0	0	0,87
(2 ; 2 ; 0)	-4,06E-8	-1,83E-8	0	1,01
(2 ; 0 ; 2)	3,36E-8	8,29E-8	1,11E-7	0,98
(3 ; 1 ; 1)	-2,54E-8	7,81E-9	-3,10E-9	1,01
(1 ; 1 ; 3)	1,13E-7	3,58E-8	9,95E-8	0,96
(2 ; 2 ; 2)	-9,15E-9	4,26E-8	3,21E-8	1,00
(4 ; 0 ; 0)	-1,19E-8	-1,12E-8	0	1,00
(0 ; 0 ; 4)	1,15E-7	0	0	0,97

Tableau 2.6 Interval de l'écart entre les résultats de la figure 2.7 et la méthode "Alpha" (Équation 2.13)

Propriétés du grain central Position de l'hétérogénéité	Propriétés effectives (MPa)	[0 ; 0 ; 0] (MPa)	[0 55 45] (MPa)
(1 ; 1 ; 1)	[-0,12 ; 0,18]	[-1,54 ; 1,24]	[-0,85 ; 0,94]
(2 ; 0 ; 0)	[-0,20 ; 0,07]	[-2,43 ; 1,83]	[-1,18 ; 1,32]
(0 ; 0 ; 2)	[-0,09 ; 0,15]	[-2,28 ; 3,37]	[-2,61 ; 1,76]
(2 ; 2 ; 0)	[-0,01 ; 0,01]	[-1,15 ; 0,86]	[-0,59 ; 0,66]
(2 ; 0 ; 2)	[-0,01 ; 0,04]	[-0,54 ; 0,34]	[-0,26 ; 0,35]
(3 ; 1 ; 1)	[-0,01 ; 0,00]	[-0,57 ; 0,36]	[-0,30 ; 0,33]
(1 ; 1 ; 3)	[-0,03 ; 0,03]	[-0,41 ; 0,55]	[-0,47 ; 0,27]
(2 ; 2 ; 2)	[-0,01 ; 0,01]	[-0,41 ; 0,25]	[-0,22 ; 0,23]
(4 ; 0 ; 0)	[-0,00 ; 0,00]	[-0,45 ; 0,29]	[-0,25 ; 0,27]
(0 ; 0 ; 4)	[-0,02 ; 0,01]	[-0,47 ; 0,59]	[-0,48 ; 0,27]

Pour mieux évaluer la précision de notre modèle et des coefficients a_i identifiés, le modèle a été appliqué aux simulations faites pour l'étude de l'influence de la distance des hétérogénéités par rapport au grain central (cf. section 2.2.1). Pour rappel, dans ces simulations, tous les grains situés à une distance d du grain central ont des orientations cristallographiques aléatoires, et tout le reste, dont le grain central, ont pour propriétés élastiques les propriétés effectives. Sur la figure 2.13 nous pouvons observer l'écart entre la simulation ÉF et le résultat obtenu par la méthode α . Nous pouvons constater un écart maximal inférieur à 3 MPa et allant en diminuant au fur et à mesure que les hétérogénéités s'éloignent du grain central.

Lors de l'identification des coefficients a_i , pour un grain central avec les propriétés effectives, un écart maximal de 0,18 MPa a été observée pour la position (1 ; 1 ; 1) (deuxième colonne du tableau 2.6), soit un facteur de distorsion $\alpha_{max} = (823.5 + 0.18)/823.5$. En admettant que cette écart se réplique dans les huit voisins étudiés, on devrait alors avoir un écart maximal de $823.5 \times (\alpha_{max}^8 - 1) = 1,44 \text{ MPa}$ or l'écart maximal que l'on observe sur la courbe 2.13 en $D=1.73$ est supérieur. On peut en conclure que l'écart dû à l'imprécision du calcul des facteurs α n'est pas la seule source d'écart. Notre hypothèse disant que l'agencement des grains voisins les uns par rapport aux autres n'a pas d'influence (exemple : les simulations 23 à 26 de la figure 2.10 donneraient les mêmes résultats) pourrait en être la cause.

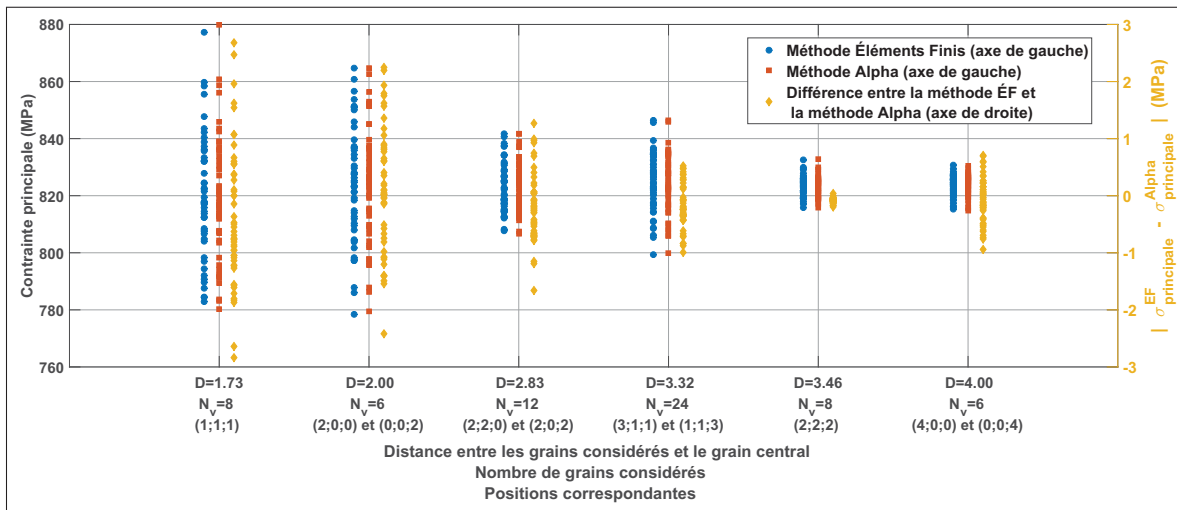


Figure 2.13 Comparaison des résultats de la partie 2.2.1 avec les résultats obtenus par la méthode "Alpha"

2.3 Résumé

Nous avons dans ce chapitre étudié l'influence du voisinage d'un grain à l'aide de simulations par la méthode des ÉF en fonction de différents paramètres :

- Distance du grain voisin par rapport au grain central
- Orientation cristallographique du grain voisin
- Position relative du grain voisin par rapport au grain central et à la direction de chargement

- Influence de l'orientation cristallographique du grain central sur l'influence des grains voisins
- Interaction de plusieurs grains voisins

À partir de l'étude de l'influence de ces différents paramètres un modèle a pu en être tiré :

$$\underline{\underline{\sigma}}^C = \underline{\underline{\sigma}}_0^C \times \prod_n^N \alpha^n(x, y, z, \varphi_1, \Phi, \varphi_2) \quad (2.15)$$

où $\underline{\underline{\sigma}}_0^C$ est la contrainte obtenue lorsque le cristal est immergé dans le matériau homogénéisé (avec les propriétés effectives) et les facteurs α^n sont les facteurs de distorsions engendrés sur le grain central par les hétérogénéités voisines de position $(x; y; z)$ et d'orientation cristallographique $[\varphi_1; \Phi; \varphi_2]$.

Deux hypothèses ont été prises sur les coefficients α : ils ne dépendent ni de l'orientation du grain central ni de celles des grains voisins. L'écart engendré par ces hypothèses est de l'ordre de 3MPa par grain voisin dans les cas extrêmes, mais reste en moyenne faible. Par conséquent, ces hypothèses seront alors conservées par la suite.

Pour un chargement en déformation uni-axiale suivant Z, une corrélation entre les facteurs α^n et les composantes du tenseur de rigidité des hétérogénéités exprimées dans le repère ϑ (cf. figure 2.8) a été faite :

$$\alpha(X, Y, Z) = a_1 \times \mathbb{C}_{3333} + a_2 \times \mathbb{C}_{1133} + a_3 \times \sqrt{2}\mathbb{C}_{3313} + a_4 \quad (2.16)$$

Les coefficients a_i dépendent de la position de l'hétérogénéité et leurs valeurs numériques sont énumérées dans le tableau 2.5.

CHAPITRE 3

ÉLABORATION D'UN NOUVEAU MODÈLE ANALYTIQUE

L'état actuel du modèle d'automates cellulaires développé au sein du LOPFA n'est pas satisfaisant dans la capture des champs de déformations en élasticité linéaire (Pourian *et al.*, 2014). Les champs de déformations élastiques sont pourtant importants en fatigue où la proportion de déformation plastique peut être faible comparée à la proportion de déformation élastique (Sweeney *et al.*, 2013). Afin de pouvoir déterminer correctement quel grain serait le plus susceptible de plastifier, il est donc nécessaire d'avoir une bonne estimation de la distribution des champs de déformation élastique.

En revenant sur les bases des modèles d'homogénéisation, et en s'appuyant sur les résultats de l'étude ÉF, un nouveau modèle d'automate-cellulaire a pu être élaboré.

3.1 Modifications apportées au modèle des automates-cellulaires

3.1.1 Choix du tenseur effectif

Dans le modèle des automates cellulaire proposé par Pourian (2014), un tenseur effectif est préalablement calculé et utilisé afin de conserver la cohésion entre micro/macro.

De façon générale dans les modèles d'homogénéisation, le tenseur effectif se calcule de la manière suivante :

$$\left. \begin{aligned} \underline{\underline{\Sigma}} &= \langle \underline{\underline{\sigma}}^C \rangle \\ &= \langle \mathbb{C}^C : \underline{\underline{\epsilon}}^C \rangle \quad (\text{comportement local}) \\ &= \langle \mathbb{C}^C : \mathbb{A}_E^C : \underline{\underline{E}} \rangle \quad (\text{localisation}) \\ &= \langle \mathbb{C}^C : \mathbb{A}_E^C \rangle : \underline{\underline{E}} \\ &= \mathbb{C}^{eff} : \underline{\underline{E}} \end{aligned} \right\} \Rightarrow \mathbb{C}^{eff} = \langle \mathbb{C}^C : \mathbb{A}_E^C \rangle \quad (3.1)$$

Dans le cadre de l'étude de Pourian (2014) le tenseur effectif n'était pas calculé à partir des tenseurs de localisation \mathbb{A}^E , mais en moyennant les tenseurs d'élasticités de chaque grain exprimés dans le même système de coordonnées :

$$\mathbb{C}^{eff} = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \mathbb{C}^C \quad (3.2)$$

Mais cette méthode est connue pour ne pas être la plus adaptée aux polycristaux (Bornert *et al.*, 2001) car trop éloignée des comportements observés.

Comme l'objectif des AC n'est pas de capturer le comportement homogénéisé mais de capturer le comportement local à partir du comportement homogénéisé, il est préférable d'utiliser d'autres méthodes de calcul du tenseur de rigidité effectif.

La méthode la plus utilisée pour les polycristaux en modèle analytique est le schéma auto-cohérent tel que (cf. section 1.2.3.3) :

$$\mathbb{C}^{eff} = \langle \mathbb{C}^C : \mathbb{A}_E^{SC} \rangle \quad (3.3)$$

Une autre solution, plus longue, mais plus précise, serait de calculer un tenseur effectif à partir des simulations ÉF et des résultats des équations (Éq. 2.10 et 2.11). Ce sera la solution utilisée par la suite.

3.1.2 Redéfinition des tenseurs de localisations

Pour le cas des automates cellulaires en élasticité linéaire, lors de la localisation, deux corrections sont appliquées (cf. section 1.2.5) :

- Une correction des tenseurs de déformation locaux afin que leur moyenne soit égale au tenseur de déformation appliqué au polycristal ;

- Une correction des tenseurs de contrainte locaux afin que leur moyenne soit égale au tenseur de contrainte calculé à l'aide du tenseur effectif, dont le choix en a été discuté (cf. section 3.1.1), et du tenseur de déformation appliqué.

La nécessité de ces facteurs correcteurs s'explique par le fait que les tenseurs de localisation ne sont pas calculés de sorte que leur moyenne soit égale au tenseur identité, comme il est généralement convenu dans les modèles d'homogénéisation, et par conséquent il est nécessaire de "forcer" la cohésion micro/macro.

Par convention dans les modèles d'homogénéisation (Bornert *et al.*, 2001), nous devons avoir la moyenne de tous les tenseurs de localisation \mathbb{A}_E^C de toutes les cellules égale au tenseur identité de telle sorte que :

$$\langle \underline{\underline{\epsilon}}^C \rangle_C = \langle \mathbb{A}_E^C : \underline{\underline{E}} \rangle_C = \langle \mathbb{A}_E^C \rangle_C : \underline{\underline{E}} = \underline{\underline{E}} \quad (3.4)$$

Ainsi, au lieu de corriger les tenseurs de déformation par un facteur de correction qui n'a pas de sens physique et qui n'est pas en norme avec les conventions des modèles d'homogénéisation, la méthode proposée ici consiste à corriger le tenseur de localisation de sorte que la moyenne des tenseurs de localisation soit égale au tenseur identité de la manière suivante :

$$\begin{aligned} \mathbb{A}_E^C &= \langle \mathbb{A}_E^C \rangle_C^{-1} \cdot \mathbb{A}_E^C \\ \Rightarrow \langle \mathbb{A}_E^C \rangle_C &= \left\langle \langle \mathbb{A}_E^C \rangle_C^{-1} \cdot \mathbb{A}_E^C \right\rangle_C = \langle \mathbb{A}_E^C \rangle_C^{-1} \cdot \langle \mathbb{A}_E^C \rangle_C = \mathbb{I} \end{aligned} \quad (3.5)$$

3.1.3 Nouvelle méthode de considération du voisinage

À partir des résultats et des conclusions tirées de la partie 2 de ce mémoire, une nouvelle proposition de modèle analytique peut être faite. Dans la section 2.3 il a été montré que la

contrainte dans un grain donné peut être calculée de la manière suivante :

$$\sigma^C = \sigma_0^C \times \prod_n^N \alpha^n(x, y, z, \varphi_1, \Phi, \varphi_2) \quad (3.6)$$

où σ_0^C est la contrainte obtenue lorsque le grain en question est immergé dans le milieu homogénéisé, et $\alpha^n(x, y, z, \varphi_1, \Phi, \varphi_2)$ le facteur de distorsion engendrée sur le grain central par un seul grain voisin localisé en $(x; y; z)$ d'orientation $[\varphi_1; \Phi; \varphi_2]$. La question de comment définir le milieu homogénéisé est intéressante et demanderait une étude à part entière, mais dans le cadre de ce mémoire, nous considérons comme milieu homogène un milieu présentant les propriétés effectives du matériau.

Les facteurs α^n ont déjà été identifiés et modélisés (Équations 2.16), et les coefficients a_i identifiés (Tableau 2.5) seront utilisés pour ce modèle analytique.

Seule la contrainte σ_0^C reste alors à être définie. Cette contrainte peut facilement être calculée à l'aide du modèle d'Eshelby et la solution diluée (équivalent au schéma Auto-Cohérent) :

$$\begin{aligned} \underline{\underline{\sigma}}_0^C &= \mathbb{C}^C : \underline{\underline{\epsilon}}^C \\ &= \mathbb{C}^C : \mathbb{A}_{E0}^C : \underline{\underline{E}} \end{aligned} \quad (3.7)$$

$$\text{avec } \mathbb{A}_{E0}^C = \left(\mathbb{I} + \mathbb{S}_E : \mathbb{C}^{eff} \right)^{-1} : (\mathbb{C}^C - \mathbb{C}^{eff})$$

Les cellules de Kelvin ayant une forme très proche de celle d'une sphère, le tenseur d'Eshelby \mathbb{S}_E peut alors être calculé en utilisant la solution d'une inclusion sphérique dans un milieu isotrope (cf. annexe II) en utilisant pour propriétés effectives de la matrice $E_{Young} = 205,7 \text{ GPa}$ et $\nu = 0,297$ (tel que calculées dans la section 2.1.7).

Reste à déterminer les voisins à prendre en considération. Il est bon de rappeler que plus les grains voisins sont loin du grain central, plus le facteur α^n tend vers 1 et donc leur impact devient de plus en plus négligeable. De plus, de par le fait que les grains éloignés sont de plus

en plus nombreux, leur influence devient de plus en plus moyennée et donc tend statistiquement vers le milieu homogène. Trois sélections de voisinage vont être faites et comparées :

- Les 14 premiers voisins (positions $(1;1;1)$, $(2;0;0)$, $(0;0;2)$ et leurs symétriques) sont pris en considération ;
- Les 40 voisins correspondant aux positions $(1;1;1)$, $(2;0;0)$, $(0;0;2)$, $(2;0;2)$, $(1;1;3)$, $(2;2;2)$, $(0;0;4)$ et leurs symétriques sont pris en considération ;
- Les 64 premiers voisins (positions $(1;1;1)$, $(2;0;0)$, $(0;0;2)$, $(2;2;0)$, $(2;0;2)$, $(3;1;1)$, $(1;1;3)$, $(2;2;2)$, $(4;0;0)$, $(0;0;4)$ et leurs symétriques) sont pris en considération.

3.1.4 Bilan sur le nouvel automate cellulaire

L'automate cellulaire développé ici a été complètement remanié comparé à la version de M.H. Pourian. Son algorithme est le suivant :

Algorithme 3.1 Algorithme du nouveau modèle analytique

Entrées : $\underline{E} = [0; 0; E_{33}; 0; 0; 0]$, \mathbb{C}^{eff} , $\mathbb{C}^{cristal}$, $(X^C; Y^C; Z^C)$, $(\varphi_1^C; \phi^C; \varphi_2^C)$, " a_i "

Sorties : $\underline{\sigma}^C$ et $\underline{\varepsilon}^C$

début

$$\mathbb{S}_E = \frac{(1+v^{eff})}{3(1-v^{eff})} \mathbb{J} + \frac{2(4-5v^{eff})}{15(1-v^{eff})} \mathbb{K} \quad (\text{cf. annexe II});$$

pour *chacune des N cellules C faire*

Changement de base (du repère cristallin au repère de référence (cf. annexe 1.3)) : $\mathbb{C}^{cristal} \xrightarrow{(\varphi_1^C; \phi^C; \varphi_2^C)} \mathbb{C}^C$;

$$\mathbb{A}_{E0}^C = (\mathbb{I} + \mathbb{S}_E : \mathbb{C}^{eff}{}^{-1} : (\mathbb{C}^C - \mathbb{C}^{eff}))^{-1};$$

pour *chacune des Nv cellules voisines Cv considérées faire*

$$X = x^{Cv} - x^C, Y = y^{Cv} - y^C, Z = z^{Cv} - z^C ;$$

Changement de base (du repère de référence au repère ϑ (cf. section 2.2.5)) :

$$\mathbb{C}^{Cv} \xrightarrow{(X; Y; Z)} \mathbb{C}_{\vartheta}^{Cv} ;$$

$$\alpha(X, Y, Z, \mathbb{C}_{\vartheta}^{Cv}) = a_1(X, Y, Z) \times C_{\vartheta}^{Cv}{}_{3333} + a_2(X, Y, Z) \times C_{\vartheta}^{Cv}{}_{1133} + \dots \\ \dots a_3(X, Y, Z) \times \sqrt{2} C_{\vartheta}^{Cv}{}_{3313} + a_4(X, Y, Z) ;$$

$$\mathbb{A}_{E0}^C = \mathbb{A}_{E0}^C \times \alpha(X, Y, Z, \mathbb{C}_{\vartheta}^{Cv}) ;$$

fin

fin

pour *chacune des N cellules C faire*

$$\mathbb{A}_E^C = \mathbb{A}_{E0}^C \times \langle \mathbb{A}_{E0}^C \rangle_C^{-1};$$

$$\underline{\varepsilon}^C = \mathbb{A}_E^C : \underline{E};$$

$$\underline{\sigma}^C = \mathbb{C}^C : \underline{\varepsilon}^C ;$$

fin

fin

3.2 Comparaison du nouvel AC avec les simulations ÉF

3.2.1 Cas du cristal de Fer

Afin de valider le nouveau modèle d'AC, il a été comparé avec les résultats obtenus par simulations ÉF réalisées sur le même polycristal représenté par une structure de Kelvin (cf. section 2.1.7). Que ce soit dans le modèle AC ou bien ÉF, la microstructure simulée est exactement identique : chacun des grains a exactement la même localisation et le même voisinage les uns par rapport aux autres. Par conséquent les résultats des deux méthodes peuvent être comparés grain par grain.

En termes de temps de calcul, pour une structure de Kelvin de 686 grains avec 224 éléments à 10 nœuds par grain et des conditions aux limites périodiques, un temps de calcul d'environ 40min a été nécessaire avec la méthode par ÉF. Pour la même microstructure et sur la même machine, un temps de calcul de seulement 5sec est nécessaire avec notre modèle analytique avec 64 voisins pris en compte.

Sur la figure 3.1 est représentée la contrainte moyenne dans la direction de chargement de chaque grain (qui est très sensiblement égale à la contrainte principale) pour la méthode ÉF et la méthode analytique en question. Le modèle Auto-cohérent (SC), et le nouveau modèle d'AC (14, 40 et 64 voisins) y sont comparés.

On observe que dans le cas du modèle SC les points forment une courbe et non un nuage de point : pour chaque orientation de grain il n'y a qu'une solution possible, alors qu'avec l'automate cellulaire les effets de voisinages sont pris en compte et par conséquent des dispersions de la contrainte moyenne pour une orientation donnée sont observées. Plus le nombre de voisins considérés est élevé, plus la dispersion des contraintes est similaire à celle obtenue par ÉF.

En bas de la figure 3.1 est représenté l'écart absolu entre la méthode ÉF et la méthode analytique : en vert est représenté l'écart absolu moyen dans tous les grains (10×686 grains) et une

boite à moustaches (Annexe III) est aussi représentée afin de nous informer de la distribution des écarts dans chacun des grains.

On observe donc une grande amélioration entre le modèle auto-cohérent et l'automate-cellulaire : l'écart moyen mais aussi les écarts extrêmes sont réduits au moins de moitié. De plus, plus le nombre de voisins considérés augmente plus la précision est bonne (un gain moyen de 2.5MPa est observé entre AC14 et AC64). L'écart quasiment inexistant entre l'AC40 et l'AC64 (0.04MPa), et l'écart observé entre l'AC14 et l'AC40 (2.5MPa) révèlent l'importance des grains voisins ayant un angle φ dans le repère ϑ proche de 0° dans la considération des grains voisins en opposition à ceux ayant un angle φ proche de 90° . De plus, d'après les observations faites des résultats de la figure 2.6, même les grains voisins situés à une distance ρ supérieur à 4 peuvent avoir un impact tout aussi important que ceux ayant un ρ plus petit. L'élargissement de la considération du voisinage pourrait donc être bénéfique à la précision du modèle.

Il est aussi important de se pencher sur les valeurs aberrantes (croix rouges des boîtes à moustache) qui peuvent aller jusqu'à un écart de 60MPa pour le cas de l'AC à 64 voisins. L'étude de ces valeurs pourrait mener à une meilleure compréhension des phénomènes et donc pourrait mener à une amélioration du modèle. L'écart relatif entre le modèle AC_{64} et la méthode ÉF a été tracé en fonction de différents paramètres : module de Young dans la direction de chargement, contrainte moyenne dans le grain obtenue par la méthode ÉF, écart relatif entre le modèle SC et la méthode ÉF (révélateur de l'hétérogénéité de l'environnement dans lequel le grain est immergé) (Figure 3.2). Une légère corrélation avec ces deux derniers paramètres peut être observée, mais il est difficile d'établir une corrélation avec ces paramètres de manière précise.

3.2.2 Application du modèle aux cristaux d'aluminium et de nickel

Les identifications des propriétés effectives (Équation 2.11) et des paramètres a_i (Section 2.2.5) ont été reproduites pour les cristaux d'aluminium et de nickel (Tableau 1.1).

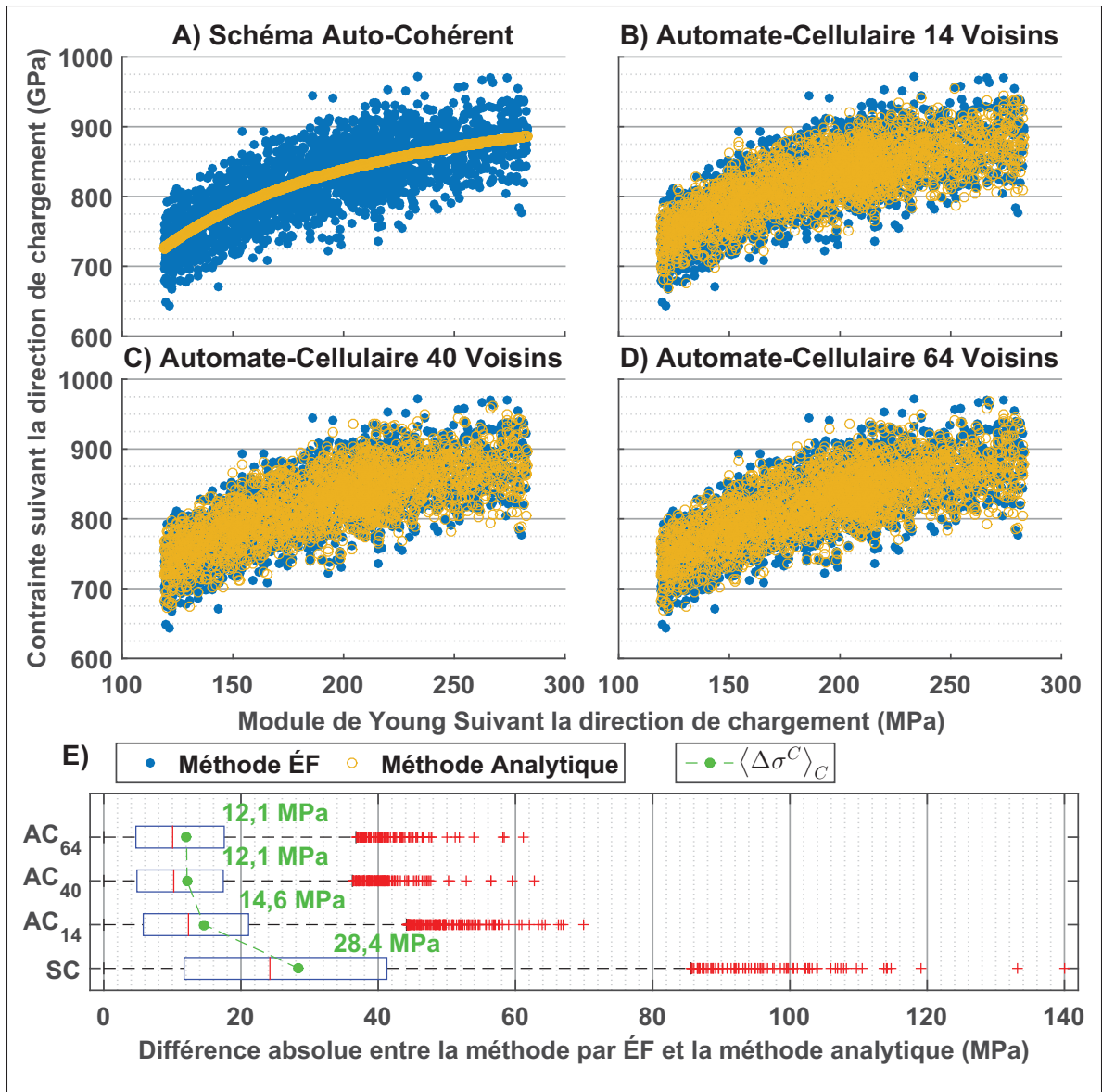


Figure 3.1 Comparaison des résultats par la méthode des EF sur un polycristal en structure de Kelvin avec des grains orientés aléatoirement (10 simulations de 686 grains) de la partie 2.1.7 avec les résultats obtenus par les différentes méthodes analytiques

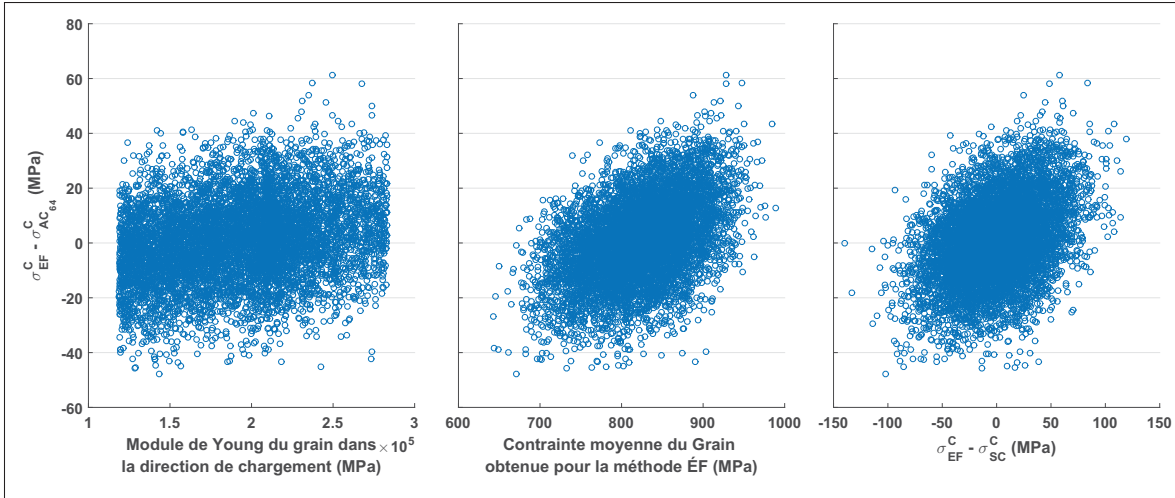


Figure 3.2 Comparaison de l'écart relatif entre le modèle AC_{64} et la méthode ÉF en fonction de différents paramètres

En utilisant les nouveaux paramètres obtenus, de nouvelles comparaisons entre l'automate cellulaire et la méthode des ÉF ont ensuite été faites.

Sur le tableau 3.1 sont présentés les coefficients a_i obtenus après optimisation. On peut observer que les valeurs des a_1 , a_2 et a_3 n'ont pas vraiment de ressemblance, mais lorsqu'on les normalise par la constante C_{11} du tenseur d'élasticité effectif, ces coefficients montrent une certaine similarité d'un matériau à l'autre, plus particulièrement pour les coefficients a_1 . Ceci laisse donc penser à la possibilité d'une formulation généralisée des coefficients a_i pouvant permettre la considération de tous les grains du polycristal dans l'influence du voisinage.

Sur le tableau 3.2 sont présentés la moyenne et le maximum des écarts absolus de chaque grain entre la méthode ÉF et le modèle analytique normalisés par l'amplitude de contrainte pour les trois matériaux. Il est alors observé que, quel que soit le tenseur élastique du matériau étudié, les valeurs restent les mêmes et l'automate cellulaire a une précision deux fois plus grande que celle du schéma auto-cohérent. Par conséquent, notre modèle d'automate cellulaire est applicable pour tout type de tenseur d'élasticité cristallin CFC avec une précision constante.

Tableau 3.1 Coefficients a_i obtenus après optimisation

Fe	Position de l'hétérogénéité	a_1 (MPa ⁻¹)	$\frac{a_1}{C_{11}^{eff}}$	a_2 (MPa ⁻¹)	$\frac{a_2}{C_{11}^{eff}}$	a_3 (MPa ⁻¹)	$\frac{a_3}{C_{11}^{eff}}$	a_4
$E_{Young} = 205,7$ (GPa)	(1 ; 1 ; 1)	-2,02E-9	-5,53E-4	1,31E-7	3,59E-2	3,16E-7	8,67E-2	0,986
	(2 ; 0 ; 0)	-1,72E-7	-4,72E-2	2,80E-8	7,69E-3	0	0	1,046
	(0 ; 0 ; 2)	6,45E-7	1,77E-1	0	0	0	0	0,816
	(2 ; 2 ; 0)	-4,06E-8	-1,12E-2	-1,83E-8	-5,03E-3	0	0	1,014
	(2 ; 0 ; 2)	3,36E-8	9,23E-3	8,29E-8	2,28E-2	1,11E-7	3,06E-2	0,981
$\nu = 0,297$								
	(3 ; 1 ; 1)	-2,54E-8	-6,96E-3	7,81E-9	2,14E-3	-3,10E-9	-8,51E-4	1,006
	(1 ; 1 ; 3)	1,13E-7	3,09E-2	3,58E-8	9,81E-3	9,95E-8	2,73E-2	0,964
$C_{11}^{eff} = 274,4$ (GPa)	(2 ; 2 ; 2)	-9,15E-9	-2,51E-3	4,26E-8	1,17E-2	3,21E-8	8,80E-3	0,998
$C_{12}^{eff} = 115,8$ (GPa)	(4 ; 0 ; 0)	-1,19E-8	-3,27E-3	-1,12E-8	-3,08E-3	0	0	1,005
	(0 ; 0 ; 4)	1,15E-7	3,16E-2	0	0	0	0	0,967

Al	Position de l'hétérogénéité	a_1 (MPa ⁻¹)	$\frac{a_1}{C_{11}^{eff}}$	a_2 (MPa ⁻¹)	$\frac{a_2}{C_{11}^{eff}}$	a_3 (MPa ⁻¹)	$\frac{a_3}{C_{11}^{eff}}$	a_4
$E_{Young} = 70,4$ (GPa)	(1 ; 1 ; 1)	3,71E-8	4,10E-3	4,13E-7	4,57E-2	8,21E-7	9,09E-2	0,972
	(2 ; 0 ; 0)	-3,78E-7	-4,19E-2	1,64E-7	1,82E-2	0	0	1,032
	(0 ; 0 ; 2)	1,68E-6	1,83E-1	0	0	0	0	0,817
$\nu = 0,345$	(2 ; 2 ; 0)	-8,65E-8	-9,58E-3	-1,90E-8	-2,11E-3	0	0	1,011
	(2 ; 0 ; 2)	9,19E-8	1,02E-2	2,30E-7	2,55E-2	2,89E-7	3,20E-2	0,976
$C_{11}^{eff} = 110,8$ (GPa)	(3 ; 1 ; 1)	-5,55E-8	-6,15E-3	3,66E-8	4,06E-3	-8,08E-9	-8,95E-4	1,004
	(1 ; 1 ; 3)	2,90E-7	3,22E-2	9,78E-8	1,08E-2	2,59E-7	2,86E-2	0,962
	(2 ; 2 ; 2)	-1,84E-8	-2,04E-3	1,21E-7	1,34E-2	8,34E-8	9,23E-3	0,995
$C_{12}^{eff} = 58,4$ (GPa)	(4 ; 0 ; 0)	-2,42E-8	-2,68E-3	-1,92E-8	-2,13E-3	0	0	1,004
	(0 ; 0 ; 4)	2,96E-7	3,28E-2	0	0	0	0	0,967

Ni	Position de l'hétérogénéité	a_1 (MPa ⁻¹)	$\frac{a_1}{C_{11}^{eff}}$	a_2 (MPa ⁻¹)	$\frac{a_2}{C_{11}^{eff}}$	a_3 (MPa ⁻¹)	$\frac{a_3}{C_{11}^{eff}}$	a_4
$E_{Young} = 222,0$ (GPa)	(1 ; 1 ; 1)	-4,89E-10	-1,47E-4	1,23E-7	3,68E-2	2,91E-7	8,72E-2	0,985
	(2 ; 0 ; 0)	-1,56E-7	-4,69E-2	2,86E-8	8,56E-3	0	0	1,045
	(0 ; 0 ; 2)	5,94E-7	1,78E-1	0	0	0	0	0,816
$\nu = 0,301$	(2 ; 2 ; 0)	-3,68E-8	-1,10E-2	-1,60E-8	-4,79E-3	0	0	1,013
	(2 ; 0 ; 2)	3,11E-8	9,33E-3	7,69E-8	2,30E-2	1,03E-7	3,08E-2	0,981
$C_{11}^{eff} = 299,7$ (GPa)	(3 ; 1 ; 1)	-2,30E-8	-6,91E-3	7,71E-9	2,31E-3	-2,86E-9	-8,57E-4	1,006
	(1 ; 1 ; 3)	1,04E-7	3,11E-2	3,31E-8	9,91E-3	9,16E-8	2,75E-2	0,964
	(2 ; 2 ; 2)	-8,26E-9	-2,48E-3	3,96E-8	1,19E-2	2,95E-8	8,86E-3	0,998
$C_{12}^{eff} = 129,1$ (GPa)	(4 ; 0 ; 0)	-1,08E-8	-3,22E-3	-1,00E-8	-3,00E-3	0	0	1,005
	(0 ; 0 ; 4)	1,06E-7	3,18E-2	0	0	0	0	0,967

Tableau 3.2 Valeur moyenne et maximale des écarts absolus de chaque grain entre la méthode ÉF et le modèle analytique normalisés par l'amplitude de contrainte

	$\Delta\sigma_{EF} = \sigma_{EF}^C \max - \sigma_{EF}^C \min$	$\left\langle \frac{ \sigma_{EF}^C - \sigma_{SC}^C }{\Delta\sigma_{EF}} \right\rangle_C$	$\max_C \left(\frac{ \sigma_{EF}^C - \sigma_{SC}^C }{\Delta\sigma_{EF}} \right)$	$\left\langle \frac{ \sigma_{EF}^C - \sigma_{AC64}^C }{\Delta\sigma_{EF}} \right\rangle_C$	$\max_C \left(\frac{ \sigma_{EF}^C - \sigma_{AC64}^C }{\Delta\sigma_{EF}} \right)$
Fe	346,3	8,2E-2	0,40	3,5E-2	0,18
Al	25,5	8,1E-2	0,41	3,2E-2	0,15
Ni	370,2	8,2E-2	0,40	3,5E-2	0,18

CONCLUSION

Une étude simplifiée de l'influence du voisinage d'un grain sur son propre comportement lors d'un chargement élastique a été réalisée dans l'objectif de développer un modèle analytique capable de bien capturer les champs de déformation/contrainte locaux.

Pour réduire le problème seulement à l'étude de l'influence des orientations cristallographiques, la structure de Kelvin a été utilisée pour réaliser les calculs ÉF d'agrégats afin d'éliminer tout effet de taille et de forme et de pouvoir s'intéresser exclusivement à la position et à l'orientation des grains .

Dans cette étude la méthode numérique par ÉF a été prise comme référence afin d'étudier les effets de voisinage, et a été comparée au modèle analytique ici développé. À partir des résultats des simulations d'un chargement en déformation uniaxiale sur un polycristal, plusieurs observations ont pu alors être faites. En utilisant un repère en coordonnées sphériques tel que l'axe Z correspond à l'axe de chargement et l'origine du repère au grain A, et considérant un grain voisin B de coordonnées sphériques $(\rho^B, \theta^B, \varphi^B)$ (ρ^B correspondant à la distance entre le grain A et le grain B, θ^B l'angle formé par l'axe x et la projection du grain B sur le plan formé par les axes X et Y, et φ^B l'angle formé par l'axe Z et la droite (AB)) (cf. figure 2.8), il a été alors observé que :

- Comme il était prévisible, de manière générale, pour une orientation cristallographique donnée et un angle φ^B fixe, plus ρ^B est grand plus l'influence du grain B sur le grain A est faible.
- De manière générale, pour une distance fixe ρ^B , plus l'angle φ^B est grand plus l'influence du grain B sur le grain A est faible.
- L'influence que le grain B peut avoir sur le grain A est faiblement influencée par l'orientation du grain A.
- L'influence que le grain B peut avoir sur le grain A est faiblement influencée par les autres grains avoisinants.

Notons $\alpha_A^B(x, y, z, \varphi_1^B, \Phi^B, \varphi_2^B)$ le rapport entre la contrainte d'un grain A immergé dans une matrice homogène et la contrainte du même grain A immergé dans la même matrice homogène mais avec en plus un grain voisin B d'orientation $(\varphi_1^B, \Phi^B, \varphi_2^B)$ tel que $\overrightarrow{AB} = [x; y; z]$. À partir de ces observations plusieurs hypothèses ont été déclarées sur ce facteur $\alpha_A^B(x, y, z, \varphi_1^B, \Phi^B, \varphi_2^B)$:

- Le facteur de distorsion α_A^B peut s'exprimer comme une fonction linéaire des composantes \mathbb{C}_{333}^B , \mathbb{C}_{113}^B et \mathbb{C}_{331}^B du tenseur d'élasticité du grain B exprimé dans le repère nommé ϑ (Fig. 2.8, Eq. 2.16). Le repère ϑ a pour origine le grain A, son axe X pointe vers le projeté du grain B sur le plan perpendiculaire à l'axe de chargement, et son axe Z a pour direction l'axe de chargement et est tel que l'angle formé par cette axe et le vecteur $\overrightarrow{AB} = [x; y; z]$ est inférieur à 90° . Les quatre coefficients de cette fonction linéaire sont à identifier pour chaque position de grain voisin à partir de simulations ÉF.
- Le facteur de distorsion α_A^B d'un grain B sur un grain A est indépendant de l'orientation du grain A.
- Le facteur de distorsion α_A^B d'un grain B sur un grain A est indépendant des autres grains voisins qui peuvent se trouver autour du grain A.
- L'influence de plusieurs grains voisins se cumule de manière multiplicative, de tel sorte que le facteur de distorsion total de plusieurs grains voisins est le produit des facteurs de distorsion de tous les grains voisins considérés.

À partir de ces observations et hypothèses un nouveau modèle analytique s'appuyant sur le schéma auto-cohérent et reprenant le principe des automates cellulaires a pu être développé (Section 3.1.4). Ce nouveau modèle a prouvé être très prometteur puisqu'en prenant les simulations ÉF pour référence, une réduction de moitié de l'écart d'estimation de la contrainte dans chaque grain a été observée par rapport à un modèle auto-cohérent. De plus ce modèle semble très bien s'adapter à différents tenseurs élastiques cristallins (Fe, Al, Ni).

RECOMMANDATIONS

Ce nouveau modèle demande encore à être perfectionné, et des améliorations y sont nécessaires. Cette étude a été réalisée dans le cadre très simplifié d'un polycristal en structure de Kelvin, avec une répartition aléatoire des orientations cristallographiques homogène, sous un chargement uniaxial élastique linéaire. Voici les différentes perspectives à réaliser afin de pousser le développement du modèle plus loin :

- Considérer l'orientation du grain central dans le calcul des facteurs de distorsion α ;
- Exploiter les résultats ÉF obtenus sur un polycristal plus en profondeur. S'intéresser aux cas extrêmes en terme de contrainte, mais aussi en terme d'écart relatif entre la méthode des ÉF et le modèle AC ;
- Étudier les effets de texture et de répartition aléatoire hétérogène des orientations cristallographiques ;
- Élargir à des chargements multiaxiaux : les facteurs α pourraient alors dépendre de bien plus de composantes du tenseur C_{ij}^n , ce qui nécessiterait plus de paramètres $a_i(X, Y, Z)$ à identifier (possibilité d'une expression matricielle du facteur α) ;
- Prendre en compte les facteurs de forme et de taille des grains. Une idée serait de diviser un grain en plusieurs cellules de Kelvin, et d'appliquer la même méthode pour chaque cellule ;
- Des études (Zhou *et al.*, 2013) ont été réalisées à la suite des travaux de J.D. Eshelby sur les interactions inclusion-inclusion en milieu homogène. Ces études pourraient être une bonne piste pour une expression généralisée des facteurs α ;
- Le développement du modèle AC devra ensuite être poussé dans le domaine plastique, en rajoutant à notre loi de comportement local de la plasticité cristalline (Annexe VI) afin de pouvoir appliquer le modèle aux problèmes de fatigue ;
- L'initiation de fissure de déroulant principalement en surface, il est nécessaire de rajouter au modèle la possibilité de prendre en compte les effets de surface.

Une fois toutes ces recommandations étudiées, l'objectif ultime d'appliquer le modèle aux problèmes de fatigue pourra alors être réalisé.

ANNEXE I

NOTIONS ET CALCULS TENSORIELS

Dans cette annexe nous allons aborder et définir toutes les notations et calculs tensoriels. Nous ne reviendrons pas sur les définitions de base, mais seulement sur les éléments qui peuvent mener à confusion et qui sont nécessaires à la reproduction exacte de l'étude présentée.

Les tenseurs utilisés dans le cadre de cette étude sont les deux tenseurs d'élasticité d'ordre 4 de dimension $3 \times 3 \times 3 \times 3$:

- Le tenseur de rigidité \mathbb{C}
- Le tenseur de souplesse \mathbb{S}

et les deux tenseurs d'ordre 2 de dimension 3×3 :

- Le tenseur de déformation $\underline{\underline{\epsilon}}$
- Le tenseur de contrainte $\underline{\underline{\sigma}}$

Dans les parties suivantes sont présentées les notations tensorielles utilisées dans ANSYS et dans l'automate-cellulaire et les conséquences sur les calculs tensoriels. Il y est aussi montré comment effectuer un changement de base avec les tenseurs.

1. Notation tensorielle

Les tenseurs \mathbb{C} , \mathbb{S} , $\underline{\underline{\epsilon}}$ et $\underline{\underline{\sigma}}$ présentent des symétries qui permettent de réduire leur notation à un nombre réduit de constantes : 6 constantes pour les tenseurs d'ordre 2 et 21 pour les tenseurs d'ordre 4. Ceci permet alors d'exprimer les tenseurs de manière simplifiée et a pour conséquence de simplifier les calculs tensoriels (par exemple le produit deux fois contracté ($\underline{\underline{\sigma}} = \mathbb{C} : \underline{\underline{\epsilon}}$ ou bien $\underline{\underline{\epsilon}} = \mathbb{S} : \underline{\underline{\sigma}}$)). Le symbole $.*$ sera rajouté pour symboliser la notation simplifiée.

Deux écoles de contraction des tenseurs se distinguent : la notation de Voigt, aussi appelée la notation de Voigt en base canonique, et la notation de Pedersen, aussi appelée la notation de Voigt modifiée, ou bien la notation de Voigt en base de tenseurs.

1.1 Notation de Voigt

La notation de Voigt est la notation utilisée dans le logiciel ANSYS, et même de manière générale dans la plupart des logiciels d'ÉF.

Sous cette convention, les tenseurs d'ordre 2 $\underline{\underline{\sigma}}$ et $\underline{\underline{\varepsilon}}$ s'expriment de la manière suivante :

$$\underline{\underline{\sigma}}^* = \begin{bmatrix} \sigma_{11} \\ \sigma_{22} \\ \sigma_{33} \\ \sigma_{12} \\ \sigma_{23} \\ \sigma_{13} \end{bmatrix} \quad et \quad \underline{\underline{\varepsilon}}^* = \begin{bmatrix} \varepsilon_{11} \\ \varepsilon_{22} \\ \varepsilon_{33} \\ 2\varepsilon_{12} \\ 2\varepsilon_{23} \\ 2\varepsilon_{13} \end{bmatrix} \quad (\text{A I-1})$$

et les tenseurs d'ordre 4 \mathbb{C} et \mathbb{S} s'expriment de la manière suivante :

$$\mathbb{C}^* = \begin{bmatrix} C_{1111} & C_{1122} & C_{1133} & C_{1112} & C_{1123} & C_{1113} \\ C_{2211} & C_{2222} & C_{2233} & C_{2212} & C_{2223} & C_{2213} \\ C_{3311} & C_{3322} & C_{3333} & C_{3312} & C_{3323} & C_{3313} \\ C_{1211} & C_{1222} & C_{1233} & C_{1212} & C_{1223} & C_{1213} \\ C_{2311} & C_{2322} & C_{2333} & C_{2312} & C_{2323} & C_{2313} \\ C_{1311} & C_{1322} & C_{1333} & C_{1312} & C_{1323} & C_{1313} \end{bmatrix}$$

(A I-2)

$$et$$

$$\mathbb{S}^* = \begin{bmatrix} S_{1111} & S_{1122} & S_{1133} & 2S_{1112} & 2S_{1123} & 2S_{1113} \\ S_{2211} & S_{2222} & S_{2233} & 2S_{2212} & 2S_{2223} & 2S_{2213} \\ S_{3311} & S_{3322} & S_{3333} & 2S_{3312} & 2S_{3323} & 2S_{3313} \\ 2S_{1211} & 2S_{1222} & 2S_{1233} & 4S_{1212} & 4S_{1223} & 4S_{1213} \\ 2S_{2311} & 2S_{2322} & 2S_{2333} & 4S_{2312} & 4S_{2323} & 4S_{2313} \\ 2S_{1311} & 2S_{1322} & 2S_{1333} & 4S_{1312} & 4S_{1323} & 4S_{1313} \end{bmatrix}$$

De cette manière, les produits deux fois contractés $\underline{\underline{\sigma}} = \mathbb{C} : \underline{\underline{\varepsilon}}$ et $\underline{\underline{\varepsilon}} = \mathbb{S} : \underline{\underline{\sigma}}$ équivalent alors à un produit matriciel : $\underline{\underline{\sigma}}^* = \mathbb{C}^* \times \underline{\underline{\varepsilon}}^*$ et $\underline{\underline{\varepsilon}}^* = \mathbb{S}^* \times \underline{\underline{\sigma}}^*$. En utilisant les constantes d'ingénieur, on a le produit contracté $\underline{\underline{\varepsilon}} = \mathbb{S} : \underline{\underline{\sigma}}$ qui s'écrit de la manière suivante :

$$\begin{bmatrix} \varepsilon_{11} \\ \varepsilon_{22} \\ \varepsilon_{33} \\ 2\varepsilon_{12} \\ 2\varepsilon_{23} \\ 2\varepsilon_{13} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{1}{E_1} & \frac{-\nu_{12}}{E_1} & \frac{-\nu_{13}}{E_1} & 0 & 0 & 0 \\ \frac{-\nu_{21}}{E_2} & \frac{1}{E_2} & \frac{-\nu_{23}}{E_2} & 0 & 0 & 0 \\ \frac{-\nu_{31}}{E_3} & \frac{-\nu_{32}}{E_3} & \frac{1}{E_3} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{G_{12}} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{G_{23}} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{G_{13}} \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} \sigma_{11} \\ \sigma_{22} \\ \sigma_{33} \\ \sigma_{12} \\ \sigma_{23} \\ \sigma_{13} \end{bmatrix} \quad (\text{A I-3})$$

Il est très important de noter que $\mathbb{C}^{*-1} \neq \mathbb{S}^*$, d'où la raison de l'utilisation de la notation de Pedersen (cf. annexe 1.2).

Nous pouvons aussi noter qu'ici est présenté la notation de Voigt "version ANSYS". Le logiciel ANSYS n'utilise pas la notation de Voigt conventionnelle où nous devrions avoir $\sigma_4^* = \sigma_{23}$, $\sigma_5^* = \sigma_{13}$ et $\sigma_6^* = \sigma_{12}$ (et il en est de même pour les trois autres tenseurs).

1.2 Notation de Pedersen

La notation de Pedersen est très légèrement différente de la notation de Voigt. Cette notation est utilisée pour les automates-cellulaires, car contrairement à la notation de Voigt, avec la notation de Pedersen nous avons $\mathbb{C}^{*-1} = \mathbb{S}^*$.

Sous cette convention, les tenseurs d'ordre 2 $\underline{\underline{\varepsilon}}$ et $\underline{\underline{\sigma}}$ s'expriment de la manière suivante :

$$\underline{\underline{\sigma}}^* = \begin{bmatrix} \sigma_{11} \\ \sigma_{22} \\ \sigma_{33} \\ \sqrt{2}\sigma_{23} \\ \sqrt{2}\sigma_{13} \\ \sqrt{2}\sigma_{12} \end{bmatrix} \quad \text{et} \quad \underline{\underline{\varepsilon}}^* = \begin{bmatrix} \varepsilon_{11} \\ \varepsilon_{22} \\ \varepsilon_{33} \\ \sqrt{2}\varepsilon_{23} \\ \sqrt{2}\varepsilon_{13} \\ \sqrt{2}\varepsilon_{12} \end{bmatrix} \quad (\text{A I-4})$$

et les tenseurs d'ordre 4 \mathbb{C} et \mathbb{S} s'expriment de la manière suivante :

$$\mathbb{C}^* = \begin{bmatrix} C_{1111} & C_{1122} & C_{1133} & \sqrt{2}C_{1123} & \sqrt{2}C_{1113} & \sqrt{2}C_{1112} \\ C_{2211} & C_{2222} & C_{2233} & \sqrt{2}C_{2223} & \sqrt{2}C_{2213} & \sqrt{2}C_{2212} \\ C_{3311} & C_{3322} & C_{3333} & \sqrt{2}C_{3323} & \sqrt{2}C_{3313} & \sqrt{2}C_{3312} \\ \sqrt{2}C_{2311} & \sqrt{2}C_{2322} & \sqrt{2}C_{2333} & 2C_{2323} & 2C_{2313} & 2C_{2312} \\ \sqrt{2}C_{1311} & \sqrt{2}C_{1322} & \sqrt{2}C_{1333} & 2C_{1323} & 2C_{1313} & 2C_{1312} \\ \sqrt{2}C_{1211} & \sqrt{2}C_{1222} & \sqrt{2}C_{1233} & 2C_{1223} & 2C_{1213} & 2C_{1212} \end{bmatrix}$$

et

$$\mathbb{S}^* = \begin{bmatrix} S_{1111} & S_{1122} & S_{1133} & \sqrt{2}S_{1123} & \sqrt{2}S_{1113} & \sqrt{2}S_{1112} \\ S_{2211} & S_{2222} & S_{2233} & \sqrt{2}S_{2223} & \sqrt{2}S_{2213} & \sqrt{2}S_{2212} \\ S_{3311} & S_{3322} & S_{3333} & \sqrt{2}S_{3323} & \sqrt{2}S_{3313} & \sqrt{2}S_{3312} \\ \sqrt{2}S_{2311} & \sqrt{2}S_{2322} & \sqrt{2}S_{2333} & 2S_{2323} & 2S_{2313} & 2S_{2312} \\ \sqrt{2}S_{1311} & \sqrt{2}S_{1322} & \sqrt{2}S_{1333} & 2S_{1323} & 2S_{1313} & 2S_{1312} \\ \sqrt{2}S_{1211} & \sqrt{2}S_{1222} & \sqrt{2}S_{1233} & 2S_{1223} & 2S_{1213} & 2S_{1212} \end{bmatrix} \quad (\text{A I-5})$$

De cette manière, les produits deux fois contractés $\underline{\underline{\sigma}} = \mathbb{C} : \underline{\underline{\varepsilon}}$ et $\underline{\underline{\varepsilon}} = \mathbb{S} : \underline{\underline{\sigma}}$ équivalent alors aussi à un produit matriciel : $\underline{\underline{\sigma}}^* = \mathbb{C}^* \times \underline{\underline{\varepsilon}}^*$ et $\underline{\underline{\varepsilon}}^* = \mathbb{S}^* \times \underline{\underline{\sigma}}^*$, mais nous avons en plus $\underline{\underline{\sigma}}^* = \mathbb{S}^{*-1} \times \underline{\underline{\varepsilon}}^*$ et $\underline{\underline{\varepsilon}}^* = \mathbb{C}^{*-1} \times \underline{\underline{\sigma}}^*$. En utilisant les constantes d'ingénieur, on a le produit contracté $\underline{\underline{\varepsilon}} = \mathbb{S} : \underline{\underline{\sigma}}$

qui s'écrit de la manière suivante :

$$\begin{bmatrix} \varepsilon_{11} \\ \varepsilon_{22} \\ \varepsilon_{33} \\ \sqrt{2}\varepsilon_{23} \\ \sqrt{2}\varepsilon_{13} \\ \sqrt{2}\varepsilon_{12} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{1}{E_1} & \frac{-\nu_{12}}{E_1} & \frac{-\nu_{13}}{E_1} & 0 & 0 & 0 \\ \frac{-\nu_{21}}{E_2} & \frac{1}{E_2} & \frac{-\nu_{23}}{E_2} & 0 & 0 & 0 \\ \frac{-\nu_{31}}{E_3} & \frac{-\nu_{32}}{E_3} & \frac{1}{E_3} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2G_{23}} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2G_{13}} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2G_{12}} \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} \sigma_{11} \\ \sigma_{22} \\ \sigma_{33} \\ \sqrt{2}\sigma_{23} \\ \sqrt{2}\sigma_{13} \\ \sqrt{2}\sigma_{12} \end{bmatrix} \quad (\text{A I-6})$$

La notation de Pedersen est la notation utilisée tout au long de la rédaction de ce document, lorsque des tenseurs d'ordre 2 ou 4 sont représentés.

1.3 Changement de base

Le changement de base d'un repère orthonormé A vers un repère orthonormé B avec pour matrice de passage \underline{P} se fait de la manière suivant :

- Soit $\underline{\underline{M}}_A$ un tenseur d'ordre 2 exprimé dans la base A , et $\underline{\underline{M}}_B$ le même tenseur d'ordre 2 exprimé dans la base B . Nous avons alors :

$$\begin{cases} \underline{\underline{M}}_A = \underline{P} \times \underline{\underline{M}}_B \times \underline{P}^{-1} \\ \underline{\underline{M}}_B = \underline{P}^{-1} \times \underline{\underline{M}}_A \times \underline{P} \end{cases} \quad (\text{A I-7})$$

- Soit \mathbb{T}_A un tenseur d'ordre 2 exprimé dans la base A , et \mathbb{T}_B le même tenseur d'ordre 2 exprimé dans la base B . Nous avons alors pour tout $(m, n, o, p) \in [1; 3]$:

$$\begin{cases} T_{Bmnop} = \sum_{i=1}^3 \sum_{j=1}^3 \sum_{k=1}^3 \sum_{l=1}^3 P_{im} P_{jn} P_{ko} P_{lp} T_{Aijkl} \\ T_{Amnop} = \sum_{i=1}^3 \sum_{j=1}^3 \sum_{k=1}^3 \sum_{l=1}^3 (P^{-1})_{im} (P^{-1})_{jn} (P^{-1})_{ko} (P^{-1})_{lp} T_{Bijkl} \end{cases} \quad (\text{A I-8})$$

Nous noterons que nous n'utilisons pas les notations simplifiées pour changer de base, nous devons retourner à la notation de base des tenseurs.

Pour information le tenseur de changement de base du repère C (repère associé au cristal d'angle d'Euler $(\varphi_1; \Phi; \varphi_2)$) au repère global G est :

$$\underline{\underline{P}} = \begin{bmatrix} c_1 c_2 - s_1 c_0 s_2 & s_1 c_2 + c_1 c_0 s_2 & s_0 s_2 \\ -c_1 s_2 - s_1 c_0 c_2 & -s_1 s_2 + c_1 c_0 c_2 & s_0 c_2 \\ s_1 s_0 & -c_1 s_0 & c_0 \end{bmatrix} \quad (\text{A I-9})$$

$$\text{avec } \begin{cases} c_1 = \cos \varphi_1 & s_1 = \sin \varphi_1 \\ c_0 = \cos \Phi & s_0 = \sin \Phi \\ c_2 = \cos \varphi_2 & s_2 = \sin \varphi_2 \end{cases}$$

ANNEXE II

MÉTHODE DE CALCUL DU TENSEUR D'ESHELBY

Différentes méthodes existent pour le calcul du tenseur d'Eshelby. La plupart d'entre elles proposent des solutions analytiques à des cas particuliers, par exemple dans le cadre de la thèse de Pourian (2014) où la solution d'Eshelby d'une inclusion sphérique immergée dans une matrice isotrope de coefficient de Poisson ν_0 a été utilisée :

$$\mathbb{S}^E = \frac{(1 + \nu_0)}{3(1 - \nu_0)} \mathbb{J} + \frac{2(4 - 5\nu_0)}{15(1 - \nu_0)} \mathbb{K} \quad (\text{A II-1})$$

où J et K sont les projecteurs isotropes tels que (avec la notation de Pedersen) :

$$\mathbb{J} = \frac{1}{3} \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \mathbb{K} = \frac{1}{3} \begin{bmatrix} 2 & -1 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 2 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & -1 & 2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 3 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 3 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 3 \end{bmatrix} \quad (\text{A II-2})$$

Pour une inclusion ellipsoïdale de dimensions a_1, a_2, a_3 immergée dans une matrice quelconque de tenseur d'élasticité \mathbb{C}_0 , le tenseur d'Eshelby est calculé pour l'intégrale sur la surface de l'inclusion de la manière suivante (Mura, 1987) :

$$S_{ijkl} = \frac{C_{0mnkl}}{8\pi} \int_{-1}^{+1} d\zeta_3 \int_0^{2\pi} (G_{imjn}(\bar{\xi}) + G_{jmin}(\bar{\xi})) d\omega \quad (\text{A II-3})$$

où

$$\begin{aligned}
 G_{ijkl}(\bar{\xi}) &= \bar{\xi}_k \bar{\xi}_l \frac{N_{ij}(\bar{\xi})}{D(\bar{\xi})} \\
 \bar{\xi}_i &= \zeta_i / a_i \\
 \zeta_1 &= (1 - \zeta_3^2)^{1/2} \cos \omega \\
 \zeta_2 &= (1 - \zeta_3^2)^{1/2} \sin \omega \\
 D(\bar{\xi}) &= \varepsilon_{mnl} K_{m1} K_{n2} K_{l3} \\
 N_{ij}(\bar{\xi}) &= \frac{1}{2} \varepsilon_{ikl} \varepsilon_{jmn} K_{km} K_{ln} \\
 K_{ik} &= C_{0ijkl} \bar{\xi}_j \bar{\xi}_l \\
 \varepsilon_{ikl} &= \begin{cases} 0 & \text{si } i = j, i = k, j = k \\ 1 & \text{si } (i, j, k) \in \{(1, 2, 3), (2, 3, 1), (3, 1, 2)\} \\ -1 & \text{si } (i, j, k) \in \{(1, 3, 2), (2, 1, 3), (3, 2, 1)\} \end{cases}
 \end{aligned} \tag{A II-4}$$

Gavazzi et Lagoudas (Gavazzi et Lagoudas, 1990) ont proposé une méthode pour calculer cette intégrale en utilisant la quadrature de Gauss suivante (*la notation d'Einstein est utilisée pour les notations suivantes*) :

$$S_{ijkl} = \frac{1}{8\pi} \sum_{p=1}^P \sum_{q=1}^Q C_{0mnkl} \times (G_{imjn}(\omega_q, \zeta_{3p}) + G_{jmin}(\omega_q, \zeta_{3p})) \times W_{pq} \tag{A II-5}$$

où P et Q sont le nombre de points d'intégration utilisés, W_{pq} le coefficient de Gauss (produit des deux coefficients de Gauss de chacune des variables d'intégration), et (ω_q, ζ_{3p}) les valeurs de (ω, ζ) aux points d'intégration.

Après une étude de convergence réalisée sur les tenseurs d'Eshelby calculés dans le cadre de cette étude, des paramètres P et Q ont été choisis afin d'optimiser le rapport entre la précision et le temps de calcul : P sera pris égal à 16 et Q à 32.

ANNEXE III

BOITE À MOUSTACHES (BOX PLOT)

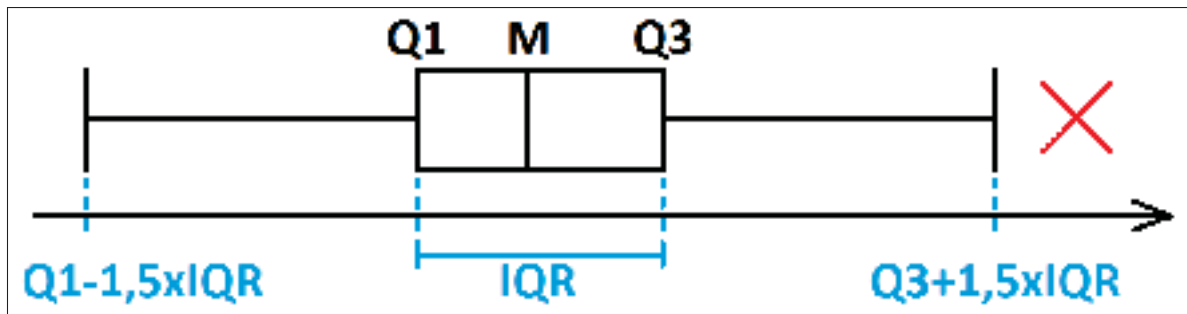


Figure-A III-1 Schéma explicatif des boîtes à moustaches (Box Plot)

Une boîte à moustache (Fig. III-1) nous informe grossièrement de la distribution d'un caractère donné en nous montrant la médiane de la distribution (M), les premier et troisième quartiles ($Q1$ et $Q3$), et ensuite l'écart interquartile (IQR). Les moustaches nous informent de l'étendue de la dispersion des valeurs considérées comme non aberrantes. Toutes les valeurs aberrantes sont situées en dehors de la zone délimitée par les moustaches et sont représentées par des croix rouges.

ANNEXE IV

GÉNÉRATION ALÉATOIRE DES ORIENTATIONS

La méthode pour générer une distribution d'orientation dans le cadre de l'étude de Pourian (2014), que nous allons appeler par la suite la méthode en *Arccos*, n'est pas la méthode la plus courante. Les trois angles d'Euler sont générés aléatoirement de la manière suivante :

$$\begin{cases} \varphi_1 = 2\pi R_1 \\ \Phi = \arccos(2R_2 - 1) \\ \varphi_2 = 2\pi R_3 \end{cases} \quad (\text{A IV-1})$$

où R_1 , R_2 et R_3 sont des nombres générés aléatoirement compris entre 0 et 1.

Shoemake (1992) a développé une méthode utilisant les quaternions qui donne une distribution d'orientation bien uniforme.

Les quaternions sont des nombres hypercomplexes beaucoup utilisés en sciences de l'ingénieur par exemple en robotique en traitement du signal, robotique ou bien en mécanique spatiale.

La méthode de génération d'orientation par les quaternions est la suivante :

- Soit R_1 , R_2 , R_3 trois nombres tirés aléatoirement compris entre 0 et 1.
- Soit γ_1 et γ_2 deux angles telles que :

$$\begin{cases} \gamma_1 = 2\pi R_1 \\ \gamma_2 = 2\pi R_2 \end{cases} \quad (\text{A IV-2})$$

– Les quatre composantes du quaternion sont alors calculées de la manière suivante :

$$\begin{cases} q_0 = \sqrt{R_3} \cos(\gamma_2) \\ q_1 = \sqrt{1 - R_3} \sin(\gamma_1) \\ q_2 = \sqrt{1 - R_3} \cos(\gamma_1) \\ q_3 = \sqrt{R_3} \sin(\gamma_2) \end{cases} \quad (\text{A IV-3})$$

Une fois le quaternion calculé, il est possible de revenir aux angles d'Euler pour la méthode suivante :

$$\begin{cases} \varphi_1 = a + b \\ \Phi = 2 \arccos \sqrt{q_0^2 + q_3^2} \\ \varphi_2 = b - a \end{cases} \quad (\text{A IV-4})$$

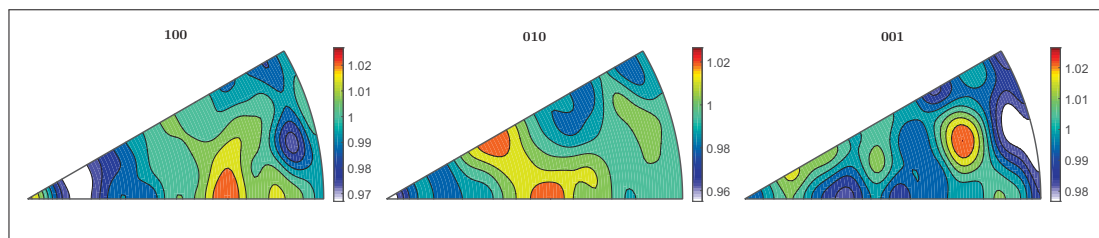
où l'on a :

$$\begin{cases} a = \frac{\pi}{4} & \text{si } |q_1| < 10^{-5} \text{ et } |q_2| < 10^{-5} \\ a = \arctan\left(\frac{q_2}{q_1}\right) & \text{sinon} \end{cases} \quad (\text{A IV-5})$$

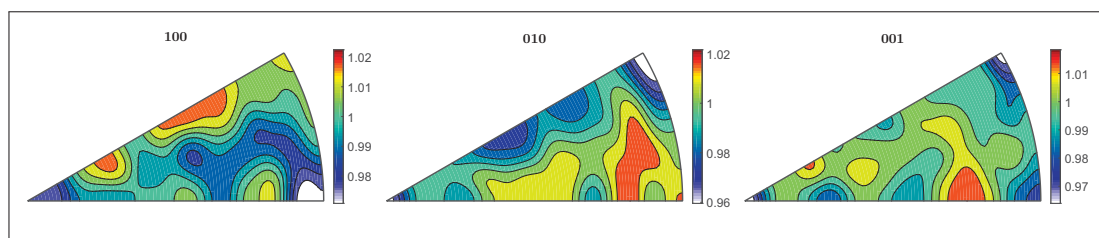
et

$$\begin{cases} b = \frac{\pi}{4} & \text{si } |q_0| < 10^{-5} \text{ et } |q_3| < 10^{-5} \\ b = \arctan\left(\frac{q_3}{q_0}\right) & \text{sinon} \end{cases} \quad (\text{A IV-6})$$

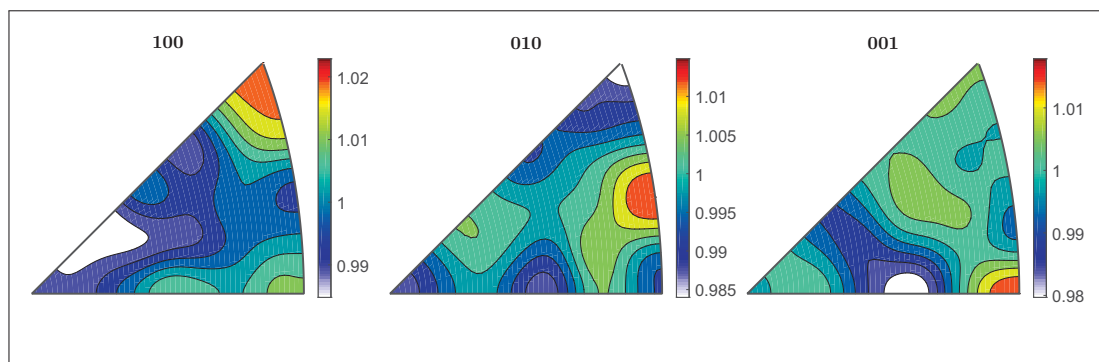
En regardant les figures de pôle inverses dans le triangle standard Cubic et Hexagonal (Fig. IV-1), nous pouvons constater que les deux méthodes semblent présenter une distribution tout aussi homogène l'une que l'autre, même si la méthode des quaternions semble tout de même présenter une meilleure distribution (l'amplitude de la "colorbar" est très légèrement inférieure dans le cas de la méthode des quaternions).



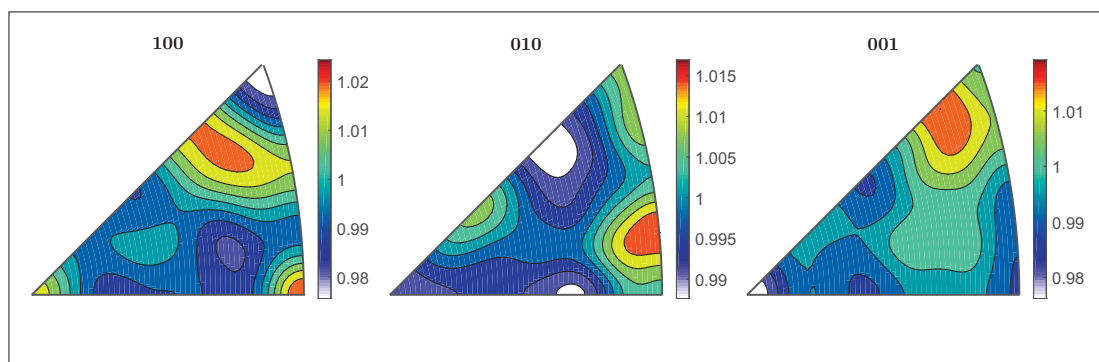
(a) Figure de pôle inverse dans le triangle standard Hexagonal de la méthode en *Arccos*



(b) Figure de pôle inverse dans le triangle standard Hexagonal de la méthode des quaternions



(c) Figure de pôle inverse dans le triangle standard Cubique de la méthode en *Arccos*



(d) Figure de pôle inverse dans le triangle standard Cubique de la méthode des quaternions

Figure-A IV-1 Isoplèthe des figures de pôle inverse des densités d'orientation

ANNEXE V

MODÈLES D'HOMOGENÉISATION ÉLASTOPLASTIQUES

À partir du modèle auto-cohérent de nombreux modèles d'homogénéisation élastoplastiques en ont découlé. Dans ces modèles il a été pris pour hypothèse que la déformation élastique est homogène dans tout le volume V (c'est-à-dire que l'on néglige l'anisotropie élastique du cristal) de façon à ce que $\underline{\underline{E}}^P = \langle \underline{\underline{\epsilon}}^P \rangle$. Par conséquent on peut écrire la relation de localisation de la manière suivante :

$$\underline{\underline{\sigma}}^i = \underline{\underline{\Sigma}} + C(\underline{\underline{E}}^P - \underline{\underline{\epsilon}}^{P,i}) \quad (\text{A V-1})$$

– Modèle de Sachs et Taylor :

Les modèles de Sachs (1928) et Taylor (1938) sont des modèles très simplifiés, mais ils permettent d'avoir un encadrement de la réponse réelle. Le modèle de Sachs nous donne une estimation de la borne inférieure du comportement, alors que le modèle de Taylor nous donne la borne supérieure.

Dans le modèle de Sachs, la contrainte est considérée homogène au sein des grains et est égale à la contrainte macroscopique. On a par conséquent la relation suivante : $\underline{\underline{\sigma}}^i = \underline{\underline{\Sigma}}$.

Dans le modèle de Taylor, la déformation élastique est négligée et la déformation plastique est considérée comme étant homogène ($\underline{\underline{E}}^P = \underline{\underline{\epsilon}}^{P,i} = \underline{\underline{E}}$). Par conséquent les interactions entre grains sont négligées et seule la loi de comportement monocristalline détermine l'état de contrainte du grain. Ce modèle donne une approximation intéressante à grande déformation où la déformation plastique est importante à côté de la déformation élastique.

– Modèle de Lin :

Le modèle de Lin (1957) est une extension du modèle de Taylor :

$$\underline{\underline{\sigma}}^i = \underline{\underline{\Sigma}} + 2\mu(\underline{\underline{E}}^P - \underline{\underline{\epsilon}}^{P,i}) \quad (\text{A V-2})$$

où μ est le module de cisaillement élastique macroscopique. Ce modèle est connu pour avoir une estimation trop élevée.

– Modèle de Kröner :

Le modèle de Kröner (1961) est le premier à utiliser la théorie de l'inclusion d'Eshelby (voir partie 1.2.3.2)(Eshelby, 1957) :

$$\underline{\underline{\sigma}}^i = \underline{\underline{\Sigma}} + \mathbb{C} : (\mathbb{I} - \mathbb{S}) : (\underline{\underline{E}}^p - \underline{\underline{\epsilon}}^{p,i}) \quad (\text{A V-3})$$

où \mathbb{C} est le tenseur d'élasticité macroscopique, \mathbb{I} est le tenseur d'identité d'ordre 4, et \mathbb{S} est le tenseur d'Eshelby. Dans le cas d'un grain sphérique l'équation peut se simplifier de la manière suivante :

$$\underline{\underline{\sigma}}^i = \underline{\underline{\Sigma}} + 2\mu(1 - \beta)(\underline{\underline{E}}^p - \underline{\underline{\epsilon}}^{p,i}) \quad (\text{A V-4})$$

avec $\beta = \frac{2(4-5\nu)}{15(1-\nu)}$, où μ est le module de cisaillement élastique et ν est le coefficient de Poisson du matériau.

Arrivé à un certain niveau de déformation plastique, ce modèle perd en précision, et devient trop rigide.

– Modèle de Hill :

Le modèle de Hill (1965a) considère le problème de l'homogénéisation de manière incrémentale. Il exprime donc ses équations en vitesse :

$$\underline{\underline{\dot{\sigma}}}^i = \underline{\underline{\dot{\Sigma}}} + \mathbb{L}^* (\underline{\underline{\dot{E}}}^p - \underline{\underline{\dot{\epsilon}}}^{p,i}) \quad (\text{A V-5})$$

où le tenseur d'influence de Hill est donné par :

$$\mathbb{L}^* = \mathbb{L}^H : (\mathbb{S}^{-1} - \mathbb{I}) \quad (\text{A V-6})$$

où \mathbb{S} est le tenseur d'Eshelby, et

$$\mathbb{L}^H = \langle \mathbb{L} : (\mathbb{L} + \mathbb{L}^*)^{-1} : (\mathbb{L}^H + \mathbb{L}^*) \rangle \quad (\text{A V-7})$$

La différence de ce modèle par rapport aux autres est que le tenseur \mathbb{L} ici n'est plus un tenseur de rigidité élastique, mais un tenseur instantané (que l'on peut aussi appeler tenseur élastoplastique tangent). Ce modèle offre une réponse moins raide, mais pour un coût de mise en œuvre plus lourde.

– Modèle de Berveiller-Zaoui (BZ) :

Le modèle BZ (Berveiller et Zaoui, 1978) est similaire au modèle au modèle de Kröner, mais reprend l'idée d'incrémentation de Hill : il s'applique au cas d'inclusion sphérique, dans un milieu d'élasticité isotrope et homogène. Il ajoute au modèle de Kröner un facteur correcteur dépendant du module plastique sécant $H_s = \Sigma_{mises} / E_{mises}^P$:

$$\underline{\underline{\sigma}}^i = \underline{\underline{\Sigma}} + 2\mu(1 - \beta)\alpha(\underline{\underline{E}}^P - \underline{\underline{\epsilon}}^{P,i}) \quad (\text{A V-8})$$

avec $\frac{1}{\alpha} = 1 + \frac{3\mu}{2H_s} = 1 + \mu \frac{3E_{mises}^P}{2\Sigma_{mises}}$. Ce modèle a fait de très bonnes preuves pour des chargements monotones en comparaison à des modélisations ÉF et est très utilisé pour obtenir une première estimation des paramètres matériaux (voir la partie sur l'identification des paramètres 2.2).

– Modèle en règle β :

Dans ce modèle, développé par Pilvin (1994), on remplace la déformation plastique par une variable d'accommodation élastoplastique :

$$\underline{\underline{\sigma}}^i = \underline{\underline{\Sigma}} + \mu(\underline{\underline{B}} - \underline{\underline{\beta}}^i) \quad \text{avec} \quad \underline{\underline{B}} = \langle \underline{\underline{\beta}} \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \underline{\underline{\beta}}^i \quad (\text{A V-9})$$

$$\dot{\underline{\underline{\beta}}}^i = \dot{\underline{\underline{\epsilon}}}^{P,i} - D(\underline{\underline{\beta}}^i - \delta \underline{\underline{\epsilon}}^{P,i}) \dot{\underline{\underline{\epsilon}}}^{P,i}_{eq} \quad (\text{A V-10})$$

Ce modèle est plus particulièrement développé pour des chargements cycliques ou même pour des chargements biaxiaux (Feyel *et al.*, 1997).

ANNEXE VI

LA PLASTICITÉ CRISTALLINE

Un monocristal est un ensemble d'atomes ordonnés de façon périodique qui forment un réseau cristallin. Il peut être considéré comme un matériau homogène (si l'on ne tient pas compte des impuretés), mais présente des propriétés mécaniques anisotropes dépendamment du type de réseau cristallin. Dans notre cas le type de réseau étudié est le réseau cubique à face centrée (CFC) (Fig. VI-3).

Les atomes du réseau sont liés entre eux par des liaisons interatomiques qui sont à l'origine de la déformation élastique des monocristaux. Arrivé à un certain seuil de contrainte interne, le potentiel interatomique (dépendant de la distance entre les atomes) devient trop important et par conséquent le cristal se déforme par un moyen moins coûteux en énergie : la déformation plastique. La déformation plastique est une déformation irréversible et est due à des défauts d'empilement dans le réseau cristallin, appelés dislocations.

1. Mécanisme des dislocations

Les dislocations sont des défauts linéaires dans le réseau cristallin facilitant le déplacement des atomes. La dislocation se déplace d'un plan atomique à l'autre entraînant la déformation plastique du cristal. Ce phénomène peut être comparé à la manière la plus aisée de déplacer un tapis de sol en formant un pli à une extrémité et en poussant ce pli jusqu'à l'autre extrémité, ou bien il peut aussi être comparé au déplacement d'une chenille (Fig. VI-1).

Les dislocations peuvent se générer d'elles-mêmes : elles peuvent se générer à la surface du matériau, mais aussi au cœur du matériau. Le mécanisme le plus important est celui de la source de Frank Read : c'est une dislocation ancrée à ses deux extrémités qui sous l'effet d'une contrainte de cisaillement s'agrandit de façon circulaire jusqu'à former une boucle de dislocation (Fig. VI-2). D'autres mécanismes permettent de générer des dislocations, mais aussi de

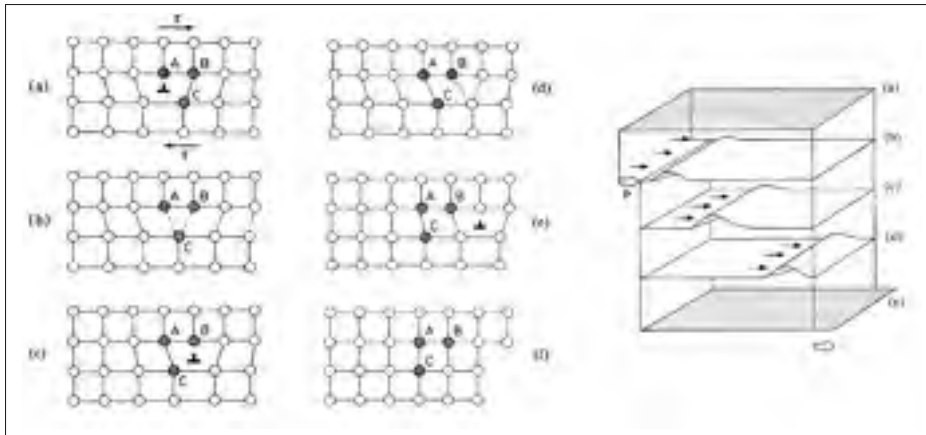


Figure-A VI-1 Schématisation du déplacement d'une dislocation. À gauche : Mouvement des atomes impliqués dans le déplacement d'une dislocation soumise à une contrainte de cisaillement. À droite : Comparaison avec le déplacement d'un tapis par translation d'un pli créé à une extrémité (Mercier *et al.*, 1999).

les annihiler, ce qui provoque les phénomènes de durcissement ou d'adoucissement en fatigue des matériaux.

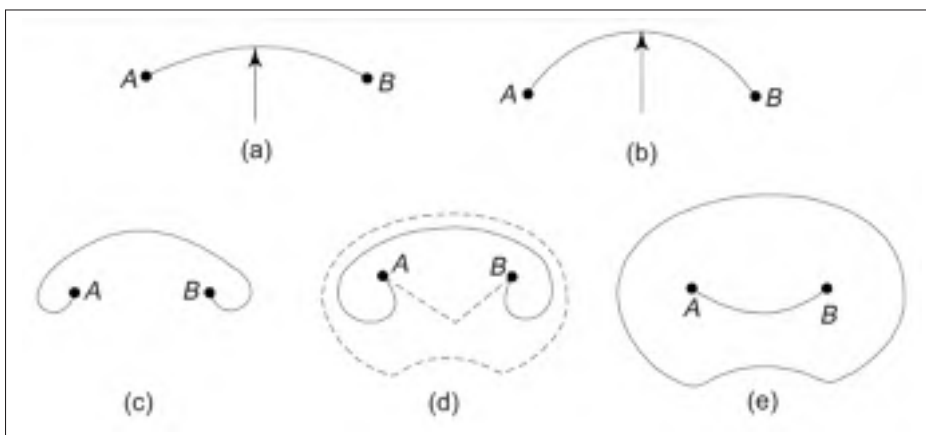


Figure-A VI-2 Formation d'une boucle de dislocations par le mécanisme de la source de Frank Read (Kakani, 2006).

Les dislocations se déplacent suivant certains plans et certaines directions : ce sont les moins coûteux en énergie, c'est-à-dire les plans et directions les plus denses en atome. La facilité

d'un plan à glisser va dépendre de son orientation par rapport à la direction de la contrainte imposée. Dans le cas du réseau CFC, les plans denses sont les plans octaédriques $\{111\}$ qui sont au nombre de 4 et pour chacun de ces plans de glissement il y a 3 directions $\langle 110 \rangle$ (Fig. VI-3, Tab. VI-1) : il y a donc un total de 12 systèmes de glissement pour les mailles CFC, ce qui rend les métaux à structure CFC facilement ductile ou malléable.

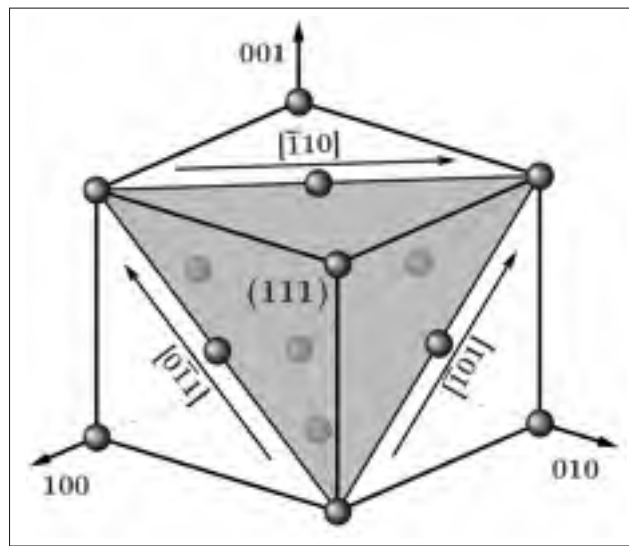


Figure-A VI-3 Systèmes de glissement octaédrique de la structure cubique à faces centrées (Guilhem, 2011).

Chacun des systèmes de glissement influe sur les autres. Plus la densité de dislocations augmente plus l'interaction entre les dislocations est importantes, ce qui rend leur déplacement de plus en plus difficile. Il y a différents types d'interactions dans un cristal CFC (Hirth, 1961) :

- Interaction dipolaire ou auto-écrouissage (interaction d'un système de glissement sur lui-même),
- Interaction coplanaire (interaction entre systèmes de glissement d'un même plan),
- Interaction colinéaire (interaction entre systèmes de glissement ayant la même direction, mais de plan différent),
- La jonction de Hirth (interaction entre les systèmes de glissement ayant leur direction de glissement orthogonale),
- La jonction glissile,

Tableau-A VI-1 Liste des indices et vecteurs de chacun des systèmes de glissement de la maille CFC.

Numéro dû système de de glissement	Direction de glissement \underline{l}^s	Normale au plan de glissement \underline{n}^s
1	$\frac{1}{\sqrt{2}} [\bar{0}11]$	$\frac{1}{\sqrt{3}} [\bar{1}11]$
2	$\frac{1}{\sqrt{2}} [101]$	$\frac{1}{\sqrt{3}} [\bar{1}11]$
3	$\frac{1}{\sqrt{2}} [110]$	$\frac{1}{\sqrt{3}} [\bar{1}11]$
4	$\frac{1}{\sqrt{2}} [0\bar{1}1]$	$\frac{1}{\sqrt{3}} [111]$
5	$\frac{1}{\sqrt{2}} [\bar{1}01]$	$\frac{1}{\sqrt{3}} [111]$
6	$\frac{1}{\sqrt{2}} [\bar{1}10]$	$\frac{1}{\sqrt{3}} [111]$
7	$\frac{1}{\sqrt{2}} [01\bar{1}]$	$\frac{1}{\sqrt{3}} [\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$
8	$\frac{1}{\sqrt{2}} [10\bar{1}]$	$\frac{1}{\sqrt{3}} [\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$
9	$\frac{1}{\sqrt{2}} [11\bar{0}]$	$\frac{1}{\sqrt{3}} [\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$
10	$\frac{1}{\sqrt{2}} [011\bar{1}]$	$\frac{1}{\sqrt{3}} [\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$
11	$\frac{1}{\sqrt{2}} [\bar{1}01\bar{1}]$	$\frac{1}{\sqrt{3}} [\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$
12	$\frac{1}{\sqrt{2}} [110\bar{1}]$	$\frac{1}{\sqrt{3}} [\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$

– Les verrous de Lomer.

Différentes études sur l'interaction des systèmes de glissement menées par Basinski et Basinski (1979), et Franciosi *et al.* (1980) ont donné lieu à des classements assez différents. Bassani et Wu (1991) effectuent un bilan de nombreux résultats expérimentaux et arrivent au classement suivant :

Auto-écrouissage < Colinéaire < Hirth < Coplanaire < Glissile < Lomer

Grâce à l'apport de la dynamique des dislocations, Benoit Devincré à l'aide de simulations apporte une nouvelle classification des interactions où l'interaction colinéaire aurait une plus forte influence (Devincré *et al.*, 2006) :

Colinéaire < Auto-écrouissage < Hirth < Lomer < Glissile < Coplanaire

Ces 6 types d'interaction peuvent tout de même être catégorisés en 3 groupes (Devincre, 2005) :

- Les interactions colinéaires et auto-écrouissage : faible interaction, car ce sont des interactions élastiques dipolaires (sans formation de jonction entre les dislocations),
- Les jonctions de Hirth, glissile et les verrous de Lomer d'interaction plus forte,
- L'interaction coplanaire : interaction ayant la plus forte influence.

2. Loi de comportement monocristallin

La variable interne qui régit la quasi-totalité des lois de plasticité cristalline est la densité de dislocations associée à un système de glissement donné : γ^s . La vitesse de déformation viscoplastique est calculée en faisant la somme de la vitesse de glissement de chacun des systèmes projetés sur leur tenseur d'orientation (ou tenseur de Schmid) :

$$\underline{\dot{\epsilon}}^{vp} = \sum_{s=1}^{n_s} \gamma^s : \underline{m}^s \quad (\text{A VI-1})$$

Avec \underline{m}^s défini par la direction de glissement \underline{l}^s et la normale au plan de glissement \underline{n}^s :

$$\underline{m}^s = \frac{1}{2} ((\underline{l}^s \otimes \underline{n}^s) + (\underline{n}^s \otimes \underline{l}^s)) \quad (\text{A VI-2})$$

Le glissement des plans engendre, en plus de la déformation plastique, une rotation du réseau cristallin (fig. VI-4). Cette rotation cristalline peut alors être exprimée de la manière suivante :

$$\underline{\dot{\omega}}^{vp} = \frac{1}{2} \sum_{s=1}^{n_s} \gamma^s : ((\underline{l}^s \otimes \underline{n}^s) - (\underline{n}^s \otimes \underline{l}^s)) \quad (\text{A VI-3})$$

Ce qui diffère d'un modèle à l'autre est la définition de la quantité de glissement plastique γ^s . Deux types de modèles se distinguent : les modèles dits physiques qui reposent sur les mécanismes de la dynamique des dislocations, et les modèles dits phénoménologiques qui s'inspirent des modèles macroscopiques et permettent après homogénéisation d'obtenir un comportement cyclique réaliste. Les lois sont généralement définies par trois équations :

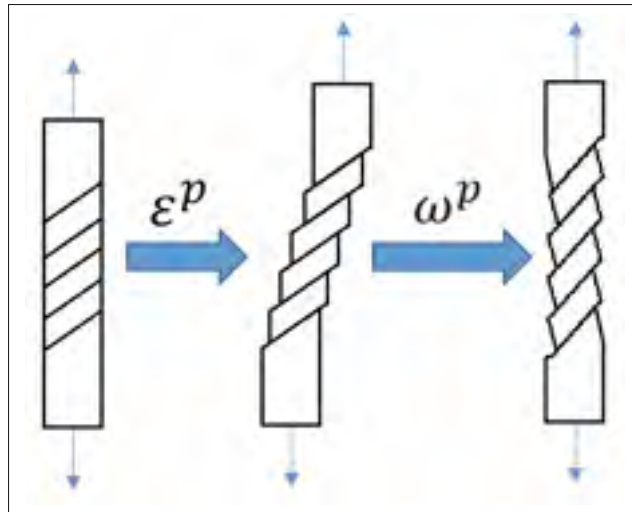


Figure-A VI-4 Schématisation des glissements de plan cristallographique engendrant déformation et rotation plastique du réseau cristallin.

- La relation d'écoulement,
- L'écrouissage cinématique (translation du domaine élastique),
- L'écrouissage isotrope (extension du domaine élastique).

2.1 Modèles physiques

Les modèles dits physiques (ou quasi-physique) ont pour particularité de se baser sur la dynamique des dislocations, et sont généralement issus de mesures physiques, apportant un sens physique aux matériaux. L'inconvénient de ce type de loi est qu'elles sont mal adaptées à des problématiques de chargement complexes. Elles sont de plus généralement lourdes d'un point de vue de calcul numérique. En voici une liste non exhaustive :

- Le modèle de Déprés (Déprés *et al.*, 2008),
- Le modèle de Tabourot-Teodosiu (Tabourot *et al.*, 1997),
- La loi DD_CC introduite par Monnet (Monnet et Vincent, 2011).

2.2 Modèles Phénoménologiques

Les modèles phénoménologiques ont la particularité après homogénéisation de donner un comportement macroscopique proche des résultats expérimentaux. Le modèle phénoménologique le plus utilisé est le modèle de Méric-Cailletaud (Méric *et al.*, 1991). Ce modèle s'inspire des modèles macroscopiques tels que le modèle d'écrouissage cinématique d'Armstrong-Frederick, ou le modèle d'écrouissage isotrope de Chaboche (Lemaitre *et al.*, 2009) : La relation d'écoulement (2.2) est une loi viscoplastique de type Norton, avec un ou plusieurs écrouissages cinématiques et isotropes.

$$\dot{\gamma}^s = \frac{\tau^s - c\alpha^s}{|\tau^s - c\alpha^s|} \left\langle \frac{|\tau^s - c\alpha^s| - r^s}{K} \right\rangle^n \quad (\text{A VI-4})$$

où K et n sont des paramètres liés au matériau (K est la consistance du matériau, et n est le coefficient de sensibilité à la vitesse de déformation), τ^s est la scission résolue du système de glissement s , α^s l'écrouissage cinématique du système de glissement s , r^s l'écrouissage isotrope du système de glissement tel que :

$$\tau^s = \underline{\underline{\sigma}} : \underline{\underline{m}}^s \quad (\text{A VI-5})$$

$$\dot{v}^s = |\dot{\gamma}^s| \quad (\text{A VI-6})$$

$$\dot{\alpha}^s = \dot{\gamma}^s - d\alpha^s \dot{v}^s \quad (\text{A VI-7})$$

$$r^s = r_0 + Q \sum_{u=1}^{n_s} h_{su} (1 - \exp(-b v^s)) \quad (\text{A VI-8})$$

où $\underline{\underline{m}}^s$ est le tenseur d'orientation du système de glissement s , c et d sont les paramètres liés à l'écrouissage cinématique, Q et b sont les paramètres liés à l'écrouissage isotrope, et h_{su} est le facteur d'interaction entre les systèmes de glissement s et u et s'exprime de la manière suivante en tenant compte des indices définis dans le tableau VI-1 :

où h_1 est pour l'auto-écrouissage, h_2 les interactions coplanaires, h_3 les jonctions de Hirth, h_4 les interactions colinéaires, h_5 les jonctions glissiles, et h_6 les verrous de Lomer.

Tableau-A VI-2 Liste des indices et vecteurs de chacun
des systèmes de glissement de la maille CFC.

Systèmes	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
1	h_1	h_2	h_2	h_4	h_5	h_5	h_3	h_5	h_6	h_3	h_6	h_5
2	h_2	h_1	h_2	h_5	h_3	h_6	h_5	h_4	h_5	h_6	h_3	h_5
3	h_2	h_2	h_1	h_5	h_6	h_3	h_6	h_5	h_3	h_5	h_5	h_4
4	h_4	h_5	h_5	h_1	h_2	h_2	h_3	h_6	h_5	h_3	h_5	h_6
5	h_5	h_3	h_6	h_2	h_1	h_2	h_6	h_3	h_5	h_5	h_4	h_5
6	h_5	h_6	h_3	h_2	h_2	h_1	h_5	h_5	h_4	h_6	h_5	h_3
7	h_3	h_5	h_6	h_3	h_6	h_5	h_1	h_2	h_2	h_4	h_5	h_5
8	h_5	h_4	h_5	h_6	h_3	h_5	h_2	h_1	h_2	h_5	h_3	h_6
9	h_6	h_5	h_3	h_5	h_5	h_4	h_2	h_2	h_1	h_5	h_6	h_3
10	h_3	h_6	h_5	h_3	h_5	h_6	h_4	h_5	h_5	h_1	h_2	h_2
11	h_6	h_3	h_5	h_5	h_4	h_5	h_5	h_3	h_6	h_2	h_1	h_2
12	h_5	h_5	h_4	h_6	h_5	h_3	h_5	h_6	h_3	h_2	h_2	h_1

L'intérêt de ce type de loi est le rapport précision du modèle / temps de calcul, et sa capacité à capturer des chargements cycliques. De plus ce modèle a fait ses preuves dans le cadre de plusieurs études de comportement polycristallin à l'échelle mésoscopique (Eberl, 1999; Barbe, 2000; Musienko, 2005; Gérard, 2008; Guilhem, 2011; Latourte *et al.*, 2013; Guery *et al.*, 2014; Chabert *et al.*, 2013). Les paramètres matériaux de ces études sont répertoriés dans le tableau VI-3.

Tableau-A VI-3 Liste des paramètres matériaux de la loi de Méric-Cailletaud utilisés dans différentes études.

Matériaux	K	n	c	d	r_0	Q	b
Unité	$MPa.s^{-n}$		MPa		MPa	MPa	
316L (Guilhem <i>et al.</i> , 2013)	12	11	40000	1500	40	10	3
16MND5 (Latourte <i>et al.</i> , 2013)	12	5	Ø	Ø	175	30	20
OFHC copper (Musienko, 2005)	5	10	4500	600	1.8	6	15
Cuivre (Gérard, 2008)	8	20	Ø	Ø	4	7	9
Cuivre (Barbe, 2000)	1	15	3402	3597	1.5	3.623	1.618
INCO600 (jeu 1) (Eberl, 1999)	20	12	1400	40	110	50	4
INCO600 (jeu 2) (Eberl, 1999)	25	12	16000	1500	18	3	10

Matériaux	h_1	h_2	h_3	h_4	h_5	h_6
Unité						
316L (Guilhem <i>et al.</i> , 2013)	1	1	0.6	12.3	1.6	1.3
16MND5 (Latourte <i>et al.</i> , 2013)	1	1	1	1	1	1
OFHC copper (Musienko, 2005)	1.0	4.4	4.75	4.75	4.75	5.0
Cuivre (Gérard, 2008)	1	1	0.2	90	3	2.5
Cuivre (Barbe, 2000)	1	4.4	4.75	4.75	4.75	5.0
INCO600 (jeu 1) (Eberl, 1999)	1	1	1	1	1	1
INCO600 (jeu 2) (Eberl, 1999)	1	1	1	1	1	1

ANNEXE VII

INSERTION DANS UN LOGICIEL DE CALCUL NUMÉRIQUE DE LA LOI DE COMPOTEMENT DE MÉRIC-CAILLETAUD (Proix, 2014)

Deux méthodes se distinguent pour résoudre un système d'équations différentielles de la forme $y' = f(t, y)$: les méthodes explicites et les méthodes implicites.

1. Méthode explicite

La méthode explicite la plus connue est la méthode d'Euler et s'exprime de la manière suivante :

$$y_{n+1} = y_n + h.f(t, y_n) \quad (\text{A VII-1})$$

D'autres méthodes plus complexes comme les méthodes Runge Kutta ou d'Adams peuvent être utilisées. L'intérêt d'utiliser ces méthodes est qu'elles sont déjà prédéfinies dans Matlab, et sont par conséquent très bien optimisées. Ces différentes méthodes sont appelées dans Matlab les fonctions "ODE" (Ordinary Differential Equations). Dans le cadre de la loi Méric Cailletaud la fonction "ODE113" donne une bonne approximation de la solution.

2. Méthode implicite

Les méthodes implicites sont connues pour être plus stables que les méthodes explicites et mieux converger vers la réelle solution.

Dans l'objectif d'insertion du modèle de comportement dans logiciel de calcul par éléments finis, la méthode la plus adéquate est la méthode de Raphson-Newton. Cette méthode numérique permet de déterminer les 0 d'une fonction de manière itérative. Elle permettrait de calculer l'incrément de contrainte entre un instant t_n et t_{n+1} .

Soit x_0 la première estimation d'un 0 d'une fonction f (ou système de fonction). La suite suivante converge alors vers un zéro de f :

$$x_{k+1} = x_k - \frac{f(t, x_k)}{f'(t, x_k)} \quad (\text{A VII-2})$$

Ou bien dans le cas d'un système d'équations :

$$X_k = X_{k-1} - \frac{\delta R(t, X_k)^{-1}}{\delta X} \cdot R(t, X_k) \quad (\text{A VII-3})$$

La méthode est itérée jusqu'à convergence de la solution telle que :

$$\text{MAX}_i \left| \frac{X_i^k - X_i^{k-1}}{X_i^k} \right| < \varepsilon_{conv} \quad (\text{A VII-4})$$

Où ε_{conv} est le critère de convergence.

3. Application à la loi Méric Cailletaud

La première étape est d'écrire notre système d'équations différentielles de façon incrémentale

($\Delta x_n = x_n - x_{n-1}$ et $\Delta x_n = \Delta t_n \cdot f(t_n, x_n)$) :

$$\left\{ \begin{array}{l} \underline{\dot{\sigma}} = \mathbb{C} : \left(\underline{\dot{\varepsilon}} - \sum_{s=1}^{n_s} \dot{\gamma}^s \cdot \underline{m}^s \right) \\ \dot{\gamma}^s = \text{sign}(\tau^s - c \cdot \alpha^s) \cdot \left\langle \frac{|\tau^s - c \cdot \alpha^s| - r^s}{k} \right\rangle^n \\ \dot{\alpha}^s = \dot{\gamma}^s - d \cdot \alpha^s \cdot |\dot{\gamma}^s| \\ \dot{p}^s = |\dot{\gamma}^s| \\ r^s = r_0 + Q \sum_{i=1}^{n_s} h_{si} (1 - \exp(-b \cdot p^i)) \\ \tau^s = \underline{\sigma} : \underline{m}^s \end{array} \right. \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \underline{\Delta \sigma}_n = \mathbb{C} : \left(\underline{\Delta \varepsilon}_n - \sum_{s=1}^{n_s} \Delta \gamma_n^s \cdot \underline{m}^s \right) \\ \Delta \gamma_n^s = \text{sign}(\tau_n^s - c \cdot \alpha_n^s) \cdot \Delta t_n \cdot \left\langle \frac{|\tau_n^s - c \cdot \alpha_n^s| - r_n^s}{k} \right\rangle^n \\ \Delta \alpha_n^s = \alpha_n^s - \alpha_{n-1}^s = \Delta \gamma_n^s - d \cdot \alpha_n^s \cdot |\Delta \gamma_n^s| \rightarrow \alpha_n^s = \frac{\Delta \gamma_n^s + \alpha_{n-1}^s}{1 + d \cdot |\Delta \gamma_n^s|} \\ \Delta p_n^s = p_n^s - p_{n-1}^s = |\Delta \gamma_n^s| \rightarrow p_n^s = |\Delta \gamma_n^s| + p_{n-1}^s \\ r_n^s = r_0 + Q \sum_{i=1}^{n_s} h_{si} (1 - \exp(-b \cdot (|\Delta \gamma_n^i| + p_{n-1}^i))) \\ \tau_n^s = \underline{\sigma}_n : \underline{m}^s = \left(\underline{\Delta \sigma}_n + \underline{\sigma}_{n-1} \right) : \underline{m}^s \end{array} \right. \quad (\text{A VII-5})$$

Les variables r_n^s , $\Delta\alpha_n^s$, τ_n^s , Δp_n^s peuvent toutes être exprimées en fonction de $\underline{\underline{\Delta\sigma}}_n$ et $\Delta\gamma_n^s$. La taille du système se réduit alors à $6 + n_s$, avec $\underline{\underline{\Delta\sigma}}_n$ et $\Delta\gamma_n^s$ comme inconnu.

Dans le paragraphe précédent, nous avons vu que la méthode de Raphson-Newton permet de déterminer les 0 d'une fonction. Dans notre cas les fonctions dont nous cherchons les 0 sont :

$$\begin{cases} \underline{\underline{\Delta\sigma}}_n = \mathbb{C} : \left(\underline{\underline{\Delta\epsilon}}_n - \sum_{s=1}^{n_s} \Delta\gamma_n^s \cdot \underline{\underline{m}}^s \right) \\ \Delta\gamma_n^s = \text{sign}(\tau_n^s - c \cdot \alpha_n^s) \cdot \Delta t_n \cdot \left\langle \frac{|\tau_n^s - c \cdot \alpha_n^s| - r_n^s}{k} \right\rangle^n \end{cases} \quad (\text{A VII-6})$$

$$\Rightarrow \begin{cases} R_1^i \left(\underline{\underline{\Delta\sigma}}_n, \Delta\gamma_n \right) = c^{-1}_{ij} \cdot \Delta\sigma_n^j - \underline{\underline{\Delta\epsilon}}_n^i + \sum_{s=1}^{n_s} g^s(\alpha_n^s, \tau_n^s, r_n^s, \Delta t_n) \cdot \underline{\underline{m}}^s = 0 \\ R_2^s \left(\underline{\underline{\Delta\sigma}}_n, \Delta\gamma_n \right) = \Delta\gamma_n^s - g^s(\alpha_n^s, \tau_n^s, r_n^s, \Delta t_n) = 0 \end{cases} \quad (\text{A VII-7})$$

avec

$$g^s(\alpha_n^s, \tau_n^s, r_n^s, \Delta t_n) = \text{sign}(\tau_n^s - c \cdot \alpha_n^s) \cdot \Delta t_n \cdot \left\langle \frac{|\tau_n^s - c \cdot \alpha_n^s| - r_n^s}{k} \right\rangle^n \quad (\text{A VII-8})$$

Notre problème de Raphson-Newton peut alors s'écrire comme un système de $6 + n_s$ équations de la manière suivante :

$$\Delta Y_k = \Delta Y_{k-1} - \frac{\delta R^{-1}}{\delta \Delta Y} (\Delta Y_k) \cdot R(\Delta Y_k) \quad (\text{A VII-9})$$

$$\Rightarrow \begin{Bmatrix} \Delta\sigma_n^{i^k} \\ \Delta\gamma_n^{s^k} \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} \Delta\sigma_n^{i^{k-1}} \\ \Delta\gamma_n^{s^{k-1}} \end{Bmatrix} - \begin{bmatrix} \frac{\delta R_1^i}{\delta \Delta\sigma_n^j} & \frac{\delta R_1^i}{\delta \Delta\gamma_n^s} \\ \frac{\delta R_2^s}{\delta \Delta\sigma_n^j} & \frac{\delta R_2^s}{\delta \Delta\gamma_n^s} \end{bmatrix}^{-1} \cdot \begin{Bmatrix} R_1^i(\Delta\sigma_n^{i^{k-1}}, \Delta\gamma_n^{s^{k-1}}) \\ R_2^s(\Delta\sigma_n^{i^{k-1}}, \Delta\gamma_n^{s^{k-1}}) \end{Bmatrix} \quad (\text{A VII-10})$$

En posant

$$\begin{cases} x^i = \Delta \sigma_n^i \\ y^s = \Delta \gamma_n^s \end{cases} \quad (\text{A VII-11})$$

nos équations peuvent se réécrire de la manière suivante :

$$R_1^i(x, y) = \textcolor{teal}{C}^{-1}_{ij} . x^j - \Delta \varepsilon_n^i + \sum_{s=1}^{n_s} g^s(\alpha^s, \tau^s, r^s, \Delta t) . m_i^s = 0 \quad (\text{A VII-12})$$

$$R_2^s(x, y) = y^s - g^s(\alpha^s, \tau^s, r^s, \Delta t) = 0 \quad (\text{A VII-13})$$

$$g^s(\alpha^s, \tau^s, r^s, \Delta t) = \text{sign}(\tau^s - \textcolor{teal}{c} . \alpha^s) . \Delta t . \left\langle \frac{|\tau^s - \textcolor{teal}{c} . \alpha^s| - r^s}{\textcolor{teal}{k}} \right\rangle^n \quad (\text{A VII-14})$$

$$p^s = |y^i| + p_{n-1}^s \quad (\text{A VII-15})$$

$$\alpha^s = \frac{1}{(1 + \textcolor{teal}{d} . |y^s|)} (y^s + \alpha_{n-1}^s) \quad (\text{A VII-16})$$

$$\tau^s = (x + \sigma_{n-1}) : m^s \quad (\text{A VII-17})$$

$$r^s = r_0 + Q \sum_{i=1}^{n_s} h_{si} (1 - \exp(-\textcolor{teal}{b} . (|y^i| + p_{n-1}^i))) \quad (\text{A VII-18})$$

Le calcul du Jacobien ($\frac{\delta R(t, X_k)}{\delta X}$) en découle de la manière suivante :

$$\frac{\delta R_1^i(x, y)}{\delta x^j} = \mathcal{C}^{-1}_{ij} + \sum_{s=1}^{n_s} m_i^s \cdot \frac{\delta g^s}{\delta x^j} \quad (\text{A VII-19})$$

$$\frac{\delta R_2^s(x, y)}{\delta x^j} = -\frac{\delta g^s}{\delta x^j} \quad (\text{A VII-20})$$

$$\frac{\delta R_1^i(x, y)}{\delta y^u} = \sum_{s=1}^{n_s} m_i^s \cdot \frac{\delta g^s}{\delta y^u} \quad (\text{A VII-21})$$

$$\frac{\delta R_2^s(x, y)}{\delta y^u} = \delta_{su} - \frac{\delta g^s}{\delta y^u} \quad (\text{A VII-22})$$

avec

$$\frac{\delta g^s}{\delta y^u} = \frac{\delta g^s}{\delta \alpha^s} \cdot \frac{\delta \alpha^s}{\delta y^u} + \frac{\delta g^s}{\delta r^s} \cdot \frac{\delta r^s}{\delta y^u} \quad (\text{A VII-23})$$

$$\frac{\delta g^s}{\delta x^j} = \frac{\delta g^s}{\delta \tau^s} \cdot \frac{\delta \tau^s}{\delta x^j} \quad (\text{A VII-24})$$

où

$$\frac{\delta g^s}{\delta \alpha^s} = -\mathcal{C} \cdot \frac{n\Delta t}{k^n} \langle |\tau^s - \mathcal{C} \cdot \alpha^s| - r^s \rangle^{n-1} \quad (\text{A VII-25})$$

$$\frac{\delta g^s}{\delta r^s} = -\text{sign}(\tau^s - \mathcal{C} \cdot \alpha^s) \cdot \frac{n\Delta t}{k^n} \langle |\tau^s - \mathcal{C} \cdot \alpha^s| - r^s \rangle^{n-1} \quad (\text{A VII-26})$$

$$\frac{\delta g^s}{\delta \tau^s} = \frac{n\Delta t}{k^n} \langle |\tau^s - \mathcal{C} \cdot \alpha^s| - r^s \rangle^{n-1} \quad (\text{A VII-27})$$

$$\frac{\delta \alpha^s}{\delta y^u} = \delta_{su} \left(\frac{1}{1 + \mathcal{D} \cdot |y^s|} - \frac{\mathcal{D} \cdot \text{sign}(y^s) \cdot (y^s + \alpha_{n-1}^s)}{(1 + \mathcal{D} \cdot |y^s|)^2} \right) = \delta_{su} \left(\frac{1 - \mathcal{D} \cdot \text{sign}(y^s) \cdot \alpha_{n-1}^s}{(1 + \mathcal{D} \cdot |y^s|)^2} \right) \quad (\text{A VII-28})$$

$$\frac{\delta \tau^s}{\delta x^j} = m_j^s \quad (\text{A VII-29})$$

$$\frac{\delta r^s}{\delta y^u} = b.Q.h_{su} \exp(-b.(|y^u| + p_{n-1}^u)) \quad (\text{A VII-30})$$

3.1 Insertion dans un logiciel de calcul par éléments finis (ABAQUS)

Les logiciels de calcul par éléments finis requièrent deux choses :

- L'incrément de contrainte, mais aussi des variables internes (α^s, p^s). Ces trois là sont calculés avec la méthode de Newton décrite précédemment.
- La matrice Jacobienne $\frac{\delta \Delta \sigma}{\delta \Delta \varepsilon}$.

La matrice Jacobienne peut se calculer de la manière suivante :

$$\frac{\delta \Delta \sigma_i}{\delta \Delta \varepsilon_j} = \frac{\Delta \sigma_i(\Delta \varepsilon + \delta \varepsilon_j) - \Delta \sigma_i(\Delta \varepsilon - \delta \varepsilon_j)}{2\varepsilon} \quad (\text{A VII-31})$$

Où $\delta \varepsilon$ est un vecteur nul, sauf en j, où il est égal à ε .

BIBLIOGRAPHIE

- Barbe, F. 2000. « Etude numérique de la plasticité d'agrégats polycristallins ». Thesis, École des Mines de Paris.
- Basinski, S. J. et Z. S. Basinski. 1979. « Plastic deformation and work hardening ». *Dislocations in Solids*, vol. 4, p. 261-271.
- Bassani, J. L. et T.-Y. Wu. 1991. « Latent hardening in single crystals II. Analytical characterization and predictions ». *Proceedings of the Royal Society of London. Series A : Mathematical and Physical Sciences*, vol. 435, n° 1893, p. 21-41.
- Benveniste, Y. 1987. « A new approach to the application of Mori-Tanaka's theory in composite materials ». *Mechanics of Materials*, vol. 6, n° 2, p. 147-157.
- Berveiller, M. et A. Zaoui. 1978. « An extension of the self-consistent scheme to plastically-flowing polycrystals ». *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, vol. 26, n° 5-6, p. 325-344.
- Bornert, M., P. Gilormini, et T. Bretheau, 2001. *Homogénéisation en mécanique des matériaux : Matériaux aléatoires élastiques et milieux périodiques*. Hermès Science Publications. 510 p.
- Boutana, M. N. 2009. « Modélisation microstructurale en fatigue/fluage à froid des alliages de titane quasi alpha par le modèle des automates cellulaires ». Thesis, École de technologie supérieure.
- Chabert, F. F. D., A. Gaubert, A. Longuet, et S. Quilici. 2013. « Calibration and validation of a constitutive model for single crystal nickel based superalloys ».
- Devincre, B. 2005. « Etude de la plasticité des solides cristallins par dynamique des dislocations à l'échelle mésoscopique ». Thesis, Université de Paris XI-Orsay.
- Devincre, B., L. Kubin, et T. Hoc. 2006. « Physical analyses of crystal plasticity by DD simulations ». *Scripta Materialia*, vol. 54, n° 5, p. 741-746.
- Di Paola, F. 2010. « Modélisation multi-échelles du comportement thermo-mécanique de composites à renforts sphériques ». Thesis, École Centrale Paris.
- Déprés, C., M. Fivel, et L. Tabourot. 2008. « A dislocation-based model for low-amplitude fatigue behaviour of face-centred cubic single crystals ». *Scripta Materialia*, vol. 58, n° 12, p. 1086-1089.
- Eberl, F. 1999. « Second Order Heterogeneities in a Multicrystal : Experimental Developments using X-Ray Diffraction and Comparison with a Finite Element Model ». Thesis, Ecole Nationale Supérieure des Arts et Métiers.

- Eshelby, J. D. 1957. « The Determination of the Elastic Field of an Ellipsoidal Inclusion, and Related Problems ». *Proceeding of the Royal Society University* 241, vol. 241, p. 376-396.
- Feyel, F., S. Calloch, D. Marquis, et G. Cailletaud. 1997. « F.E. computation of a triaxial specimen using a polycrystalline model ». *Computational Materials Science*, vol. 9, n° 1-2, p. 141-157.
- Forest, S. et M. Fivel. 2004. « Plasticité cristalline et transition d'échelle : cas du polycristal ». *Techniques de l'ingénieur Étude des métaux et des alliages : état métallique*, vol. base documentaire : TIB345DUO, n° ref. article : m4017.
- Forest, S., G. Cailletaud, D. Jeulin, F. Feyel, I. Galliet, V. Mounoury, et S. Quilici. 2002. « Introduction au calcul de microstructures ». *Mécanique & Industries*, vol. 3, n° 5, p. 439-456.
- Franciosi, P., M. Berveiller, et A. Zaoui. 1980. « Latent hardening in copper and aluminium single crystals ». *Acta Metallurgica*, vol. 28, n° 3, p. 273-283.
- Gavazzi, A. C. et D. C. Lagoudas. 1990. « On the numerical evaluation of Eshelby's tensor and its application to elastoplastic fibrous composites ». *Computational Mechanics*, vol. 7, n° 1, p. 13-19.
- Gérard, C. 2008. « Mesures de champs et identification de modèles de plasticité cristalline ». Thesis, Université Paris-Nord - Paris XIII.
- Guery, A., F. Latourte, F. Hild, et S. Roux. 2014. « Identification of crystal plasticity law parameters using kinematic measurements in polycrystals ». In *WCCM XI - 11th World Congress on Computational Mechanics*. p. 8 pp.
- Guilhem, Y. 2011. « Étude numérique des champs mécaniques locaux dans les agrégats polycristallins d'acier 316L sous chargement de fatigue ». Thesis, École Nationale Supérieure des Mines de Paris.
- Guilhem, Y., S. Basseville, F. Curtit, J.-M. Stéphan, et G. Cailletaud. 2013. « Numerical investigations of the free surface effect in three-dimensional polycrystalline aggregates ». *Computational Materials Science*, vol. 70, p. 150-162.
- Hashin, Z. et S. Shtrikman. 1963. « A variational approach to the theory of the elastic behaviour of multiphase materials ». *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, vol. 11, n° 2, p. 127-140.
- Hill, R. 1965a. « Continuum micro-mechanics of elastoplastic polycrystals ». *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, vol. 13, n° 2, p. 89-101.
- Hill, R. 1965b. « A self-consistent mechanics of composite materials ». *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, vol. 13, n° 4, p. 213-222.

- Hirth, J. P. 1961. « On Dislocation Interactions in the fcc Lattice ». *Journal of Applied Physics*, vol. 32, n° 4, p. 700-706.
- Kakani, S., 2006. *Material Science*. New Age International (P) Limited, Publishers. 106 p.
- Kanit, T. 2003. « Notion of representative volume element for heterogeneous materials : statistical and numerical approach ». Thesis, École Nationale Supérieure des Mines de Paris.
- Kröner, E. 1961. « Zur plastischen verformung des vielkristalls ». *Acta Metallurgica*, vol. 9, n° 2, p. 155-161.
- Latourte, F., N. Rupin, M. He, A. Parrot, et S. Leclercq. 2012. « Full Field Measurements used for Assessing Industrial Issues-Two Examples ». *Procedia IUTAM*, vol. 4, p. 92-105.
- Latourte, F., N. Rupin, et J.-M. Proix. 2013. « Plasticité cristalline dans un acier bainitique revenu : simulations pour la validation de modèles à partir de mesures de champs ».
- Lebensohn, R. A. 2001. « N-site modeling of a 3D viscoplastic polycrystal using Fast Fourier Transform ». *Acta Materialia*, vol. 49, n° 14, p. 2723-2737.
- Lemaitre, J., J. Chaboche, A. Benallal, et R. Desmorat, 2009. *Mécanique des matériaux solides - 3ème édition*. Dunod. 577 p.
- Lin, T. H. 1957. « Analysis of elastic and plastic strains of a face-centred cubic crystal ». *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, vol. 5, n° 2, p. 143-149.
- Meakin, P., 1998. *Fractals, Scaling and Growth Far from Equilibrium*. Cambridge University Press. 678 p.
- Mercier, J., G. Zambelli, et W. Kurz, 1999. *Introduction à la science des matériaux*. Presses Polytechniques et Universitaires Romandes. 505 p.
- Michel, J. C., H. Moulinec, et P. Suquet. 1999. « Effective properties of composite materials with periodic microstructure : a computational approach ». *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, vol. 172, n° 1-4, p. 109-143.
- Monnet, G. et L. Vincent. 2011. « Loi de comportement en plasticité cristalline pour acier à basse température ». *Mechanics & Industry*, vol. 12, n° 03, p. 193-198.
- Montheillet, F. 2004. « Comportement rhéologique des matériaux métalliques multiphasés ». *Techniques de l'ingénieur Mise en forme des métaux : aspects rhéologiques et métallurgiques*, vol. base documentaire : TIB476DUO, n° ref. article : m3010.
- Montheillet, F. et P. Gilormini. 1996. « Predicting the mechanical behavior of two-phase materials with cellular automata ». *International Journal of Plasticity*, vol. 12, n° 4, p. 561-574.

- Mori, T. et K. Tanaka. 1973. « Average stress in matrix and average elastic energy of materials with misfitting inclusions ». *Acta Metallurgica*, vol. 21, n° 5, p. 571-574.
- Moulinec, H. et P. Suquet. 1998. « A numerical method for computing the overall response of nonlinear composites with complex microstructure ». *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, vol. 157, n° 1-2, p. 69-94.
- Méric, L., P. Poubanne, et G. Cailletaud. 1991. « Single Crystal Modeling for Structural Calculations : Part 1—Model Presentation ». *Journal of Engineering Materials and Technology*, vol. 113, n° 1, p. 162-170.
- Mura, T., 1987. *Micromechanics of Defects in Solids*. Martinus Nijhoff Publishers.
- Musienko, A., A. Tatschl, K. Schmidegg, O. Kolednik, R. Pippan, et G. Cailletaud. 2007. « Three-dimensional finite element simulation of a polycrystalline copper specimen ». *Acta Materialia*, vol. 55, n° 12, p. 4121-4136.
- Musienko, A. 2005. « Plasticité cristalline en présence de grandes déformations et d'endommagement ». Thesis, Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris.
- Nemat-Nasser, S. et M. Hori, 1999. *Micromechanics : Overall Properties of Heterogeneous Materials*. Elsevier.
- Pilvin, P. 1994. « The contribution of micromechanical approaches to the modelling of inelastic behaviour of polycrystals ».
- Pourian, M. H. 2014. « Modélisation du comportement micromécanique des alliages de titane en dwell-fatigue par la méthode des automates cellulaires ». Thesis, École de technologie supérieure.
- Pourian, M. H., P. Pilvin, F. Bridier, et P. Bocher. 2014. « Heterogeneous elastic behavior of HCP titanium polycrystalline aggregates simulated by cellular automaton and finite element ». *Computational Materials Science*, vol. 92, p. 468-475.
- Proix, J.-M. 23/10/2014 2014. *Comportements élastoviscoplastiques mono et polycristallins*. Report.
- Quey, R. 06 February 2016 2016. « Neper ». <<http://neper.sourceforge.net/>>.
- Roters, F., P. Eisenlohr, L. Hantcherli, D. D. Tjahjanto, T. R. Bieler, et D. Raabe. 2010. « Overview of constitutive laws, kinematics, homogenization and multiscale methods in crystal plasticity finite-element modeling : Theory, experiments, applications ». *Acta Materialia*, vol. 58, n° 4, p. 1152-1211.
- Sachs, G. 1928. « Plasticity problems in metals ». *Transactions of the Faraday Society*, vol. 24, p. 84-92.

- Sarma, G. B. et P. R. Dawson. 1996. « Texture predictions using a polycrystal plasticity model incorporating neighbor interactions ». *International Journal of Plasticity*, vol. 12, n° 8, p. 1023-1054.
- Shoemaker, K., 1992. *Uniform random rotations*, p. 124-132. Academic Press Professional, Inc. ISBN 0-12-409671-9.
- Simmons, G. et H. Wang, 1971. *Single crystal elastic constants and calculated aggregate properties : a handbook*. éd. 2d ed. Cambridge, Mass., M.I.T. Press : The M.I.T. Press.
- Sweeney, C. A., W. Vorster, S. B. Leen, E. Sakurada, P. E. McHugh, et F. P. E. Dunne. 2013. « The role of elastic anisotropy, length scale and crystallographic slip in fatigue crack nucleation ». *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, vol. 61, n° 5, p. 1224-1240.
- Tabourot, L., M. Fivel, et E. Rauch. 1997. « Generalised constitutive laws for f.c.c. single crystals ». *Materials Science and Engineering : A*, vol. 234–236, p. 639-642.
- Taylor, G., 1938. *Plastic Strain in metals*. volume 62. J. Inst. Metals.
- Tulloue, G. 2015. « Les angles d'Euler ». <http://www.sciences.univ-nantes.fr/sites/genevieve_tulloue/Meca/Cinematique/euler1.html>.
- Zhao, Y., S. A. Billings, et D. Coca. 2009. « Cellular automata modelling of dendritic crystal growth based on Moore and von Neumann neighbourhoods ». *International Journal of Modelling, Identification and Control*, vol. 6, n° 2, p. 119-25.
- Zhou, K., W. Wayne Chen, L. M. Keer, X. Ai, K. Sawamiphakdi, P. Glaws, et Q. Jane Wang. 2011. « Multiple 3D inhomogeneous inclusions in a half space under contact loading ». *Mechanics of Materials*, vol. 43, n° 8, p. 444-457.
- Zhou, K., H. J. Hoh, X. Wang, L. M. Keer, J. H. L. Pang, B. Song, et Q. J. Wang. 2013. « A review of recent works on inclusions ». *Mechanics of Materials*, vol. 60, p. 144-158.